現代量子物理学

［基礎と応用］

上田正仁著

培風館

はじめに

量子物理学の現状を一言でいうと，さまざまな研究領域が同時並行的に創生，融合，発展しており，伝統的な専門分野の枠には必ずしも収まらない．量子力学と情報学が融合して生まれた量子情報や，原子物理学，低温物理学，量子光学の境界領域で発展している原子気体のボース–アインシュタイン凝縮はその顕著な例である．本書は，東京工業大学，広島大学，東京大学などで大学院生および学部学生を対象に行った講義のために準備したノートを整理したものである．講義のねらいは，近年注目されている量子物理学のトピックスのいくつかを紹介することを通じて，量子論の不思議さとその魅力をさまざまな角度から眺め，それによって量子論に対する理解を深めてもらうことにある．

読者としては，学部学生，大学院生，および，本書に取り上げられたトピックスに関心のある方々を想定している．題材は量子物理学であるが，量子情報に関連する専門的な文献にしばしば現れるトピックスを数多く取り上げた点にも特色がある．これらの題材は，経験的知識をあまり必要としないために，量子論の本質を簡単明瞭な形で例示するうえで有用であり，また，最先端の文献を読むうえでも参考になると思う．

本書の内容は，以下のような問題意識に基づき構想された．

量子力学は原子の世界 (10^{-10} m) を記述する法則として誕生し，その適用範囲をよりミクロなスケール (原子核，クォーク) へと拡大してきた．他方，マクロなスケール (1 m) における我々の日常的な経験事実は古典力学の予言と一致している．このことから，“ミクロな世界＝量子的世界” そして “マクロな世界＝古典的世界” という固定観念が形成された．

しかし，微細加工技術，低温技術，および精密測定技術の急速な進展を背景として，量子力学の適用範囲がミクロなスケールからミクロとマクロの中間に位置するメゾスコピックなスケール (10^{-6} m) へ，そして，ついには，マクロなスケールへと劇的に拡大されつつある．さらに，量子論に内在する不可思議な性質とされる「量子状態のもつれ」,「非局所性」,「非分離性」は，これまでは純粋にアカデミックな研究対象であったが，現在では，量子コンピューターのよ

うな古典物理学では実現不可能な夢を可能にしてくれる新しいデバイス原理として応用され，また，そのための基礎研究が進展している．具体例をあげると，

- メゾスコピック系の物理
  - 量子伝導現象: 電気伝導における波動性と非局所性の研究
  - クーロン–ブロッケイド: 電子の粒子と波動の二重性の両方を利用したトンネル現象の人工制御
- 巨視的量子現象
  - 巨視的量子トンネル現象とコヒーレンス，シュレーディンガーの猫状態
  - 巨視的物質波，原子レーザー，原子気体や分子の超流動
- 量子光学
  - スクイズド状態: 量子状態の発生における不確定性原理の人工制御
  - 量子非破壊測定: 量子状態の測定における不確定性原理の人工制御
- 量子情報
  - 量子暗号: 不確定性原理に基づく盗聴不可能な通信
  - 量子テレポーテーション: 未知の量子状態の情報を離れた場所に移動
  - 量子計算: 重ね合わせの原理や量子状態のもつれなどを利用した超高速計算

これらの分野はいずれも，理学と工学の先端分野が融合しつつあることの実例になっている．

非局所性や量子状態のもつれは，アインシュタインやシュレーディンガーに代表される量子論の創始者たちが量子論に内在する特異な性質としていち早く認識し，また，それゆえに量子論を最終理論としては受け入れられない根拠としてあげたものである．上にあげた分野は，これらの性質を単に受け入れるだけでなく，それを巧みに応用しようとして生まれた分野である．このような現在の状況は，後の時代から振り返ると，大きなパラダイムシフトの時代と映るであろう．すなわち，直感に反する量子論の奇妙な性質を，単に形而上学的な，あるいは，純粋にアカデミックな研究対象としてとらえる時代から，実用上不可欠なデバイス原理として積極的に応用する時代への転換期であると．

科学の大きな進展は，しばしば新しい技術革新を背景として起こることを歴史は示している．熱力学は蒸気機関の発展，量子力学は製鉄業および分光学の発展，量子電気力学はマイクロ波技術の発展が，背景として存在したことは広

く知られている．現在進行中の科学の変革の背景は，工業化社会から情報化社会への転換，半導体技術を基礎とするコンピューターや通信などの情報処理技術の革新 —いわゆるIT革命— であるといえよう．くしくも，2000年度のノーベル物理学賞はIT革命の基盤となる技術 (集積回路，高速トランジスター，レーザーダイオード) を開拓した研究者たちに与えられた．

本書の構成は以下のようになっている．第1章では，量子論の本質的な事項 (論理構成，不確定性関係，波動関数の解釈など) に関する解説を行う．特に，量子力学が粒子性と波動性を統一するアインシュタイン–ド・ブロイの関係式から出発していかに論理的に構成されているか，また，粒子描像と波動描像を統一する代償として，なぜ物理的実在という概念を捨てなければならないかということを明らかにする．また，通常の教科書ではあまり触れられることのない不確定性関係に関する進んだトピックスについても述べる．第2章では，対称性と保存則，角運動量，密度演算子，および観測の理論の解説を行う．第3章では，後章の理解に必要な電磁場の量子化の概説を行う．第4章では，1光子と2光子の干渉効果が量子化された電磁場を用いてどのように記述されるかを説明し，古典的な波動現象との違いがどこに現れるのかを説明する．第5章では，単一光子と単一原子が相互作用する物理現象の解説を行い，また，自然放出の制御法とその応用について述べる．第6章では，ミクロな量子現象がマクロに増幅された巨視的量子現象，ボース–アインシュタイン凝縮，および超流動現象について述べる．第7章では，量子力学と情報学が融合して誕生した量子情報理論 (量子計算と暗号) への入門的解説を行う．

本書では，さまざまなトピックスが取り上げられているが，それらを理解するための必要事項は第1〜3章にまとめ，第4章以降は独立に読むことができる構成になっている．記述にあったっては，他の書物を参照することなく内容が理解できるように論理的整合性に注意を払った．また，基本事項を補足し，内容の理解を助けるための演習問題を随所につけた．さらに，個別のテーマをより深く学習しようとする読者のために，参考文献を脚注に適宜載せた．

読者に量子物理学の新しい潮流の一端を知っていただき，その魅力を少しでもお伝えすることができれば本書を執筆した目的は達成されたと考えます．

2004年8月

上田正仁

目　次

量子力学の基礎 I ———— 1

1.1 アインシュタインード・ブロイの関係式　1
1.2 シュレーディンガー方程式　2
1.3 波動関数の解釈　6
　1.3.1 コペンハーゲン解釈　6
　1.3.2 多世界解釈　11
1.4 重ね合わせの原理　13
1.5 オブザーバブル　13
1.6 時 間 発 展　18
1.7 ヒルベルト空間と状態ベクトルの表現　18
1.8 ハイゼンベルクの運動方程式　22
1.9 相互作用表示　23
1.10 不確定性関係　24
　1.10.1 ハイゼンベルクの不確定性関係　24
　1.10.2 非可換観測量の同時測定　31
　1.10.3 一般の非可換観測量の間の不確定性関係　33
　1.10.4 時間とエネルギーの不確定性関係　37
1.11 調和振動子　39
1.12 トンネル効果と量子反射　44

量子力学の基礎 II ———— 49

2.1 対称性と保存則　49
2.2 角 運 動 量　54
　2.2.1 軌道角運動量　55
　2.2.2 スピン角運動量　64

2.2.3 角運動量の合成 66
2.3 密度演算子 70
2.4 測定の理論 75

3. 電磁場の量子化 —— 79

3.1 マクスウェル方程式 79
3.2 ゲージ不変性 81
3.3 アハラノフ-ボーム効果 85
3.4 自由場の正準形式 88
3.5 電荷と磁束の不確定性関係 90
3.6 第二量子化 92
3.7 光子数状態 94
3.8 コヒーレント状態 95
3.9 スクイズド状態 99
3.10 位相演算子 103

4. 量子力学における干渉効果 —— 109

4.1 二重スリットの実験 109
4.2 光の強度を表す演算子 112
4.3 第二量子化形式による 1 粒子干渉の理論 113
4.4 独立な光源からの光の干渉 115
4.5 自発的対称性の破れ 118
4.6 量子情報の消去とコヒーレンスの回復 120
4.7 2 粒子干渉 122
4.7.1 空間的非局所相関 122
4.7.2 時間的非局所相関 126
4.7.3 2 粒子干渉の一般論 128

5. 原子と光との相互作用 —— 131

5.1 ジェインズ-カミングス模型 131
5.2 ラビ分裂とラビ振動 133
5.3 崩壊現象と復活現象 137

5.4　量子回帰定理　140
5.5　量子ゼノン効果　142
5.6　アインシュタイン-ポドルスキー-ローゼン相関　144
5.7　複数の原子と光との相互作用　146
5.8　自然放出のワイスコップ-ウィグナー理論　150
5.9　共振器量子電気力学　152

6.　巨視的量子現象 —— ボース-アインシュタイン凝縮と超流動　157

6.1　素粒子と複合粒子の統計性　158
6.2　同種粒子の識別不可能性の原理　159
6.3　理想気体のボース-アインシュタイン凝縮　162
6.4　密 度 行 列　164
6.5　非対角長距離秩序　168
6.6　フェルミ粒子系における非対角長距離秩序　173
6.7　ボース粒子系の多体波動関数の性質　175
6.8　非平衡な BEC と超流動　176
6.9　オイラー方程式　179
6.10　2 流体模型　181
6.11　ランダウの判定条件　183
6.12　常流動体密度　184
6.13　巨視的量子現象　186
6.14　シュレーディンガーの猫のパラドックス
—— 重ね合わせの原理の帰結　189
6.15　巨視的量子コヒーレンス　191
6.16　レゲット-ガーグの不等式　192

7.　量 子 情 報 —— 197

7.1　量子ビット　197
7.2　量子ビットのパワー　199
7.3　量子ゲート　203
7.4　クローン禁止定理　208
7.5　非直交な状態の判別　210

7.6　ベルの不等式　212
7.7　グリーンバーガー–ホーン–ツァイリンガー (GHZ) 状態　217
7.8　量子テレポーテーション　219
7.9　超高密度符号化　222
7.10　量子アルゴリズム　223
7.11　量子暗号　228

付　録 ―――――――――― **231**

A.1　デルタ関数　231
A.2　ベクトル解析　233
A.3　汎関数　235

索　引 ―――――――――― **237**

誤植や誤りが見つかった場合は，ホームページ
http://millennium.ap.titech.ac.jp/
でお知らせする予定です．

1. 量子力学の基礎 I

1.1 アインシュタイン–ド・ブロイの関係式

古典論では電子は粒子，光は波であり両者は異質なものである．しかし，量子論では「電子も光も粒子と波動の二重性をもっている」といわれる．これは一体何を意味するのだろうか．これを理解するためには，そもそも粒子性とは何か，また，波動性とは何かを再確認する必要がある．

速度 $\boldsymbol{v}$ で運動している質量 m の自由粒子は，運動量 $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ とエネルギー $E = m\boldsymbol{v}^2/2$ をもっている．粒子性は，質量と速度，あるいは，運動量とエネルギーを与えることによって特徴づけられるといえよう．他方，自由な波である平面波は波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ と周波数 ω を用いて $e^{i(\boldsymbol{kx}-\omega t)}$ と記述される．粒子–波動の二重性とは，粒子と波をそれぞれ特徴づける物理量の組 $(\boldsymbol{p}, E)$ と $(\boldsymbol{k}, \omega)$ が同じ情報をもつということを意味している．これは，両者が共通の普遍定数で結ばれていることを意味している．すなわち，

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}, \qquad E = \hbar\omega. \tag{1.1}$$

これらの関係式は，**アインシュタイン–ド・ブロイの関係式**とよばれる．(1.1) に現れる普遍定数

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34}\mathrm{J \cdot s} \tag{1.2}$$

は作用の次元をもち，**プランク定数**とよばれる[1]．

1) 物理定数は異なった物理量を関連づける役割を果たしている．光速は時間と空間を結びつける．プランク定数は，アインシュタイン–ド・ブロイの関係式を通じて粒子性と波動性を統一する．

量子論は，$(\boldsymbol{p}, E)$ の物理量の組で記述される粒子像と $(\boldsymbol{k}, \omega)$ の組で記述される波動像を，アインシュタイン–ド・ブロイの関係式に基づいて統一する理論である．例えば，$E = \hbar\omega$ は，周波数 ω をもった電磁波がエネルギー $\hbar\omega$ を単位とする粒子 (これを**エネルギー量子**という) の集合として振る舞うことを表している．また，$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$ から

$$\lambda \equiv \frac{2\pi}{|\boldsymbol{k}|} = \frac{h}{|\boldsymbol{p}|} \tag{1.3}$$

が導かれるが，これは，運動量 $\boldsymbol{p}$ をもった物質は波長 $\lambda = h/|\boldsymbol{p}|$ の波 (これを**物質波**という) として振る舞うことを意味している．λ は**ド・ブロイ波長**とよばれる．逆に，波長が λ の量子 (例えば光子) は運動量 $|\boldsymbol{p}| = h/\lambda$ をもつといえる．(1.3) は **ド・ブロイの関係式**とよばれる．

1.2 シュレーディンガー方程式

以下では，簡単のために空間が 1 次元の場合を考える．3 次元の場合への拡張は容易である．自由な波である平面波は，

$$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} \tag{1.4}$$

と表される．粒子の運動量とエネルギーは波の描像ではどのように記述されるかを考えよう．アインシュタイン–ド・ブロイの関係式 (1.1) より

$$p\Psi = \hbar k\Psi = \hbar k e^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}e^{i(kx-\omega t)} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi, \tag{1.5}$$

$$E\Psi = \hbar\omega\Psi = \hbar\omega e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}e^{i(kx-\omega t)} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi. \tag{1.6}$$

これらの結果は，p, E といった粒子性を表す物理量を波動描像で記述しようとすると，物理量が関数 Ψ に作用する微分演算子として表されることを示している．これらを，古典力学における物理量と区別するために記号 $(\hat{\ })$ をつけて表そう．

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{E} = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{1.7}$$

古典力学は，このような置き換えを行うことによって量子力学へと移行できる．これを**量子化の手続き**という．

ポテンシャル $V(x)$ の中にある質量 m の粒子のエネルギーは，

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{1.8}$$

で与えられる．これに量子化の手続きを施すと次の結果が得られる．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right]\Psi(x,t). \tag{1.9}$$

これを，**シュレーディンガー方程式**といい，$\Psi(x,t)$ は**波動関数**とよばれる．量子力学では系の状態は波動関数で表され，その時間発展はシュレーディンガー方程式によって記述される．(1.9) の右辺に現れる微分作用素

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{1.10}$$

は**ハミルトニアン**とよばれ，これを用いるとシュレーディンガー方程式は次のように書ける．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = \hat{H}\Psi(x,t). \tag{1.11}$$

多くの問題では，系のエネルギー E が一定の**定常状態**を考える．このとき，波動関数は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = E\Psi(x,t) \tag{1.12}$$

を満足するので，これを時間について積分すると，

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}\Psi(x) \tag{1.13}$$

が得られる．ここで，$\Psi(x) \equiv \Psi(x, t=0)$ である．(1.13) を (1.9) に代入すると，定常状態のシュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right]\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{1.14}$$

が得られる．

シュレーディンガー方程式は，空間座標については 2 階の微分方程式であるから，波動関数を一意に決めるためには，空間のある 1 点における波動関数とその微分の値か，あるいは，空間の異なる 2 点における波動関数の値が必要である．波動関数はこれらの境界条件を通じて空間の大域的な情報に依存する[2)]．こうして量子力学の問題を解くことは，境界条件を満足するハミルトニアンの

2) ニュートンの運動方程式 $F = m\,d^2x/dt^2$ は時間についての 2 階微分方程式なので，解は，ある時刻における粒子の位置と速度を与えることで一意に決定される．

固有関数 Ψ と**固有エネルギー** E を求めることに帰着される．固有エネルギーが与えられたとき，それに対応する線形独立な固有関数が複数存在する場合は，その固有エネルギーは**縮退している**といわれる．

以下では，$|\Psi|^2$ を全空間で積分した値は 1 に規格化されているものとする．

$$\int |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1. \tag{1.15}$$

1.6 節で示されるように，規格化条件 (1.15) はある時刻 (例えば $t=0$) で成立すると，それ以降の時刻でも自動的に満足される．

シュレーディンガー方程式を解く具体例として，無限に高い**井戸型ポテンシャル**

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < L), \\ \infty & (x \le 0,\ x \ge L) \end{cases} \tag{1.16}$$

に閉じ込められた電子の運動を考えよう．領域 $0 < x < L$ ではポテンシャルは 0 なので，シュレーディンガー方程式 (1.9) は，

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) \tag{1.17}$$

となる．解として，変数分離形 $\Psi(x,t) = f(x)g(t)$ を仮定すると，

$$\frac{i\hbar}{g(t)}\frac{d}{dt}g(t) = -\frac{\hbar^2}{2mf(x)}\frac{d^2}{dx^2}f(x) = \text{定数} \equiv E \tag{1.18}$$

が得られる．$g(t)$ は視察により

$$g(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{1.19}$$

で与えられることがわかる．他方，$f(x)$ は，

$$\frac{d^2}{dx^2}f(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2}f(x) \equiv -k^2 f(x) \tag{1.20}$$

と書くと，一般解は，

$$f(x) = A\sin kx + B\cos kx \tag{1.21}$$

と書ける．波動関数は $x = 0, L$ で 0 とならなければならないという境界条件を課すと，$B = 0$ でかつ波数は次のような離散的な値しかとれないことがわかる．

$$k_n = \frac{\pi}{L}n \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots). \tag{1.22}$$

したがって，電子のエネルギーも次のように離散化される．

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2mL^2} \qquad (n = 1, 2, 3, \cdots). \tag{1.23}$$

これから，電子の最低エネルギーは 0 にはならないことがわかる．これを**零点エネルギー**という．定数 A は規格化条件から決められる．

$$\int_0^L |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \int_0^L f^2(x) \, dx = \frac{A^2 L}{2} = 1 \longrightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}. \tag{1.24}$$

こうして，1 に規格化された波動関数は次のように与えられる．

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{L}} e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \sin \frac{\pi x}{L}. \tag{1.25}$$

波動関数 (1.25) をみると，古典論とは異なり量子論では電子が壁付近で見出される確率は 0 になることがわかる．これは，波動性のおかげで境界条件をコントロールすることにより，電子の存在確率を制御できることを示している．

問題 1.1 ポテンシャルが発散しない有限な領域では，波動関数とその空間に関する 1 階微分が連続であることを示せ．このことから，ポテンシャルが有限のとびを示すような境界 (例えば，$x < a$ で $V(x) = 0$，$x > a$ で $V(x) = V_0$) でも，波動関数とその空間に関する 1 階微分は連続であることがわかる．さらに，ポテンシャルがデルタ関数的に発散する点では，波動関数の 1 階微分は有限のとびを示すが，波動関数は連続となることを示せ．

【解答】 定常状態のシュレーディンガー方程式 (1.14) から

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Psi. \tag{1.26}$$

両辺を $x - \epsilon$ から $x + \epsilon$ まで積分すると (ϵ は正の微小量)

$$\frac{d\Psi(x+\epsilon)}{dx} - \frac{d\Psi(x-\epsilon)}{dx} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{x-\epsilon}^{x+\epsilon} dx' \left[V(x') - E\right] \Psi(x'). \tag{1.27}$$

ポテンシャルが x で発散しなければ，$\epsilon \to +0$ の極限で右辺は 0 となるので微分は連続であり，したがって，波動関数も連続となる．もし，ポテンシャルが $x = a$ でデルタ関数的発散を示せば $V(x) = c\delta(x-a) + \tilde{V}(x)$ ($\tilde{V}(x)$ は $x = a$ で発散しない関数) とおけるので，(1.27) から $\Psi'(x)$ は $x = a$ で $2mc\Psi(a)/\hbar^2$ だけのとびを示すことがわかる．しかし，それをもう一度微小区間で積分することにより，波動関数は連続であることがわかる． ∎

1.3 波動関数の解釈

1.3.1 コペンハーゲン解釈

シュレーディンガーは初め，波動関数 Ψ を**実在の波**と考えたようである．実在の波とは水の波のような連続体の波を意味し，任意に分割することができる．ところが，この解釈は電子などの素粒子が分割できないという経験事実と矛盾する．いま，箱の中に電子が 1 個存在し，電子の波動関数が箱全体に広がっている状況を考えよう．仕切りを入れて箱を 2 つの領域に分けると，電子の波動関数も分割される．しかし，観測すると電子はどちらか一方の領域でのみ見出され，電子の断片が観測されるということは決して起こらない．この実験事実は，波動関数を実在の波とは解釈できないことを示している．

この問題を解決するために，ボルンは波動関数が実在の波ではなく確率の波であると解釈した．この解釈によると，観測ごとに電子は仕切りの左側か右側のどちらか一方にのみ見出されるが，どちらになるかはランダムで予測できない．しかし，同じ初期状態に対する測定を多数回くり返して統計をとると，電子がそれぞれの領域に見出される確率は，波動関数の絶対値の 2 乗 $|\Psi(x,t)|^2$ をそれぞれの領域で積分した値によって与えられる．このように，波動関数を確率の波の振幅 —**確率振幅**— と解釈することによって，分割できない素粒子が，干渉効果のような波動性を示すという実験事実と矛盾しない首尾一貫した量子力学の体系が完成した．波動関数の絶対値の 2 乗を確率密度と解釈することをボルンの**確率解釈**という．

光は古典的には波として振る舞う．しかし，光の強さを十分弱くしてフォトンカウンターとよばれる極めて感度のよい検出器で測定すると，光子は光電効果により 1 個ずつ粒子的に検出される．このような微弱な光に対して，図 1.1(a) に示したような，ヤングの干渉実験をするとどんな観測結果が得られるだろうか．光子が一度に高々 1 個しか検出されないくらい弱い光を測定すると，個々の光子が検出される場所は全くランダムである (図 1.1(b))．しかし，これらの事象を多数積算すると，図 1.1(c) のように干渉縞が現れる．これは，ボルンの確率解釈に他ならない．

電子に対してもヤングの干渉実験が行われており，図 1.2 のように光子の場合と同様な結果が得られている．古典論では電子は粒子であり，光は波であり両者は全く異質なものであったが，量子論では電子も光も粒子と波動の二重性

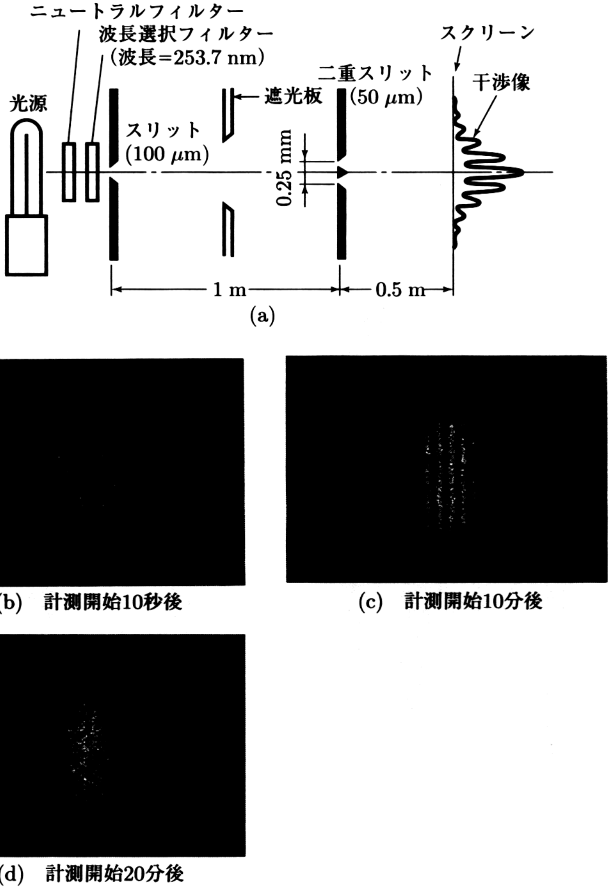


図 1.1 微弱な光に対するヤングの二重スリットの実験

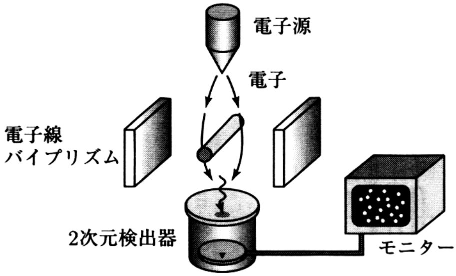
(a) 実験の概念図．ニュートラルフィルターは，同時に 1 個以上の光子が存在しないように光の強度を弱める役割を果たす．

(b) 光の強度を十分に弱くすると，光子はスクリーン上に輝点として観測される．これは，光の粒子性を表している．輝点がどの位置で観測されるかは毎回ランダムに変化し予測できない．

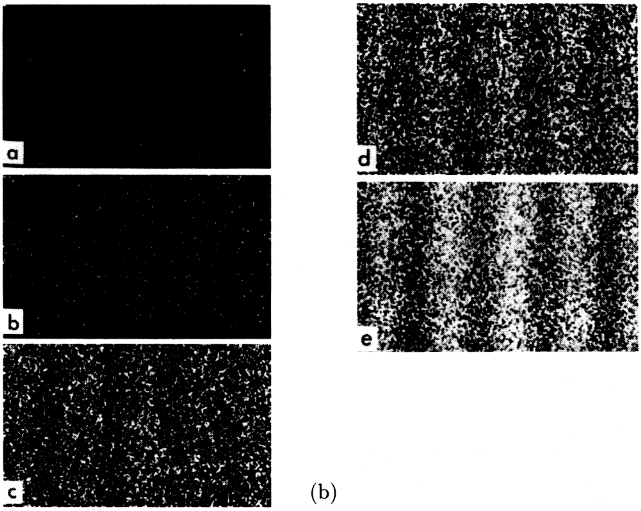
(c) しかし，そのような輝点を多数積算すると古典的な波動描像で計算される干渉縞が現れる．この実験は，ボルンの確率解釈の正しさを実証している．

(d) 片側のスリットを閉じて実験をした場合．この場合は，干渉縞は現れない．

［土屋裕ら，テレビジョン学会誌 **36**, 1010 (1982)，浜松ホトニクス社 提供］



(a) 電子の二重スリットの実験



(b)

図 1.2 電子に対するヤングの干渉実験
(a) 実験の概念図．電子源から出射した電子は，途中で 2 つの経路に分けられ，その後再び重ね合わさって蛍光板上で検出される．
(b) 光子の場合と同じように，個々の電子が観測される位置は毎回ランダムに変化するが，データを積算すると次第に干渉縞が現れることがわかる．［外村彰氏 提供］

をもち，1 粒子のレベルでみる限り両者に本質的な違いはないことが，図 1.1 と図 1.2 を比較することで理解できよう．

ある現象が量子的か古典的かを判定する 1 つの基準は，$\hbar \to 0$ の極限での振舞いと比較することである．このとき，光は波になり，電子は粒子となるので，

光が粒子性を示せばそれは光にとっての量子性であり，また，電子が干渉効果を示せばそれは電子にとっての量子性であるといえる．しかし，現実には，$\hbar$ は 0 ではないので，光も電子も粒子性と波動性の両方を示す．もちろん，電子は電荷をもっており，光子は電荷をもたないという差は存在するが，粒子性と波動性という側面に注目する限り両者には本質的な差はなく，それぞれ対応する現象が存在する[3]．光と電子の違いは，複数の粒子が存在するときの**量子統計**（フェルミ粒子とボース粒子の違い）において初めて現れる（第 4 章参照）．

基礎方程式であるシュレーディンガー方程式が確率振幅しか与えないという事実は，個々の観測結果は全くランダムで，それを確実に予言することが原理的に不可能であることを意味する．アインシュタインは，この事実から量子力学を現存する最良の理論と認めつつも，これを最終的な理論として受け入れることは終生拒否した．彼の有名な「神はさいころを振らない」という言葉は，この立場を端的に表している．これに対して，ボーアに代表されるコペンハーゲン学派の人々は，量子論が我々に突きつける上記の事実をさらに推し進めて，「測定が行われるまでは実在というものを考えてはいけない，確率振幅という情報のみが存在する」と主張した．これを，**コペンハーゲン解釈**という．

電子の波動関数は観測するまでは箱全体に広がっているが，観測するとその直後の電子の位置は測定精度の範囲で空間のある一点に定まる．これは，あたかも観測によって波動関数がその点に収縮したように思えるので，観測による**波束の収縮**とよばれる．しかし，コペンハーゲン解釈に従えば，波動関数は実在の波ではなく確率振幅という情報を記述しているものなので，波束の収縮は電子の存在に関する我々の不確かな知識が観測行為の結果，より確実なものに

---

3)　やや専門的になるが，波動現象を例にとると，次の表のように対応する現象が存在する．

光	電　子
ヤングの干渉	ヤングの干渉，アハラノフ-ボーム効果
後方散乱の増大	アンダーソン局在
スペックルパターン	コンダクタンスの普遍的揺らぎ

このうち，光に対応する現象は，$\hbar \to 0$ なる極限をとっても主要項として残る．他方，電子に対する現象は，$\hbar \to 0$ なる極限では電子を粒子として記述する古典的なボルツマン輸送の項が主要項となり，上記の波動現象はそれに対する $\hbar/(E_F\tau)$ （E_F はフェルミ・エネルギー，τ は電子の散乱時間）のオーダーの量子補正として現れる．これらの量子補正を研究する学問は，メゾスコピック系の物理として発展している．興味ある読者は，例えば次の文献を参照されたい．長岡洋介「局在・量子ホール効果・密度波」現代物理学叢書（岩波書店），川畑有郷「メゾスコピック系の物理学」新物理学シリーズ 31（培風館）．

なったという事実を述べているのであり，実在の波が収縮するとは考えてはいけない．

コペンハーゲン解釈のアキレス腱は，フォン・ノイマンが指摘したように測定される系と測定器，ひいては測定器の出力を読む観測者の間に量子と古典の明瞭な境界線を引くことができないことである (これを**フォン・ノイマンの連鎖**という)．これは，波束の収縮が，いつ，どこで起こるのかが原理的に決められず，我々が観測結果を認識したときに，波束の収縮が起こるのだという極論にまで行き着く．コペンハーゲン解釈は，測定結果を確定させる (すなわち波束を収縮させる) 役割をもつ**古典的測定器**の存在を前提としており，観測結果を解釈するという，まさに測定の最終段階で古典論の助けを必要としている[4)]．このことは，我々自身がその一部分である宇宙の量子力学的状態を解釈する際には原理的な困難となるかもしれない．

通常，一般化された理論は (一般化される前の) もとの理論の助けを借りることなく首尾一貫している．例えば，相対性理論は，速度が光速度に比べて十分小さい極限としてニュートン力学を含んでいるが，後者の助けを借りることなく理論は成立している．量子力学の状態の時間発展を記述するシュレーディンガー方程式は，プランク定数が 0 となる極限でニュートン力学のエネルギーの表式に帰着する[5)]が，コペンハーゲン解釈では波動関数を解釈するうえで古典的測定器が必要なので，量子論は古典論から独立した理論体系であるとはいえない．ただし，これは量子論が内部矛盾を含んでいることは意味しない．コペンハーゲン解釈は，このように微妙な問題点を含んでいるものの実用上有効であり，量子力学の標準的な解釈となっている．

---

4) 数学的には，「古典的測定器」とは，出力変数が古典的な確率変数に従うものとして定義される．すなわち，測定器の出力は各瞬間ごとにある値に決まっており，重ね合わせの原理には従わないと仮定される．

5) $\Psi = Ae^{\frac{i}{\hbar}S}$ をシュレーディンガー方程式 (1.9) に代入して，両辺の実部と虚部をそれぞれ等しいとおくと，実部から

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + V - \frac{\hbar^2}{2mA}\frac{\partial^2 A}{\partial x^2}$$

が得られる．$\hbar \to 0$ の極限では**量子ポテンシャル**とよばれる右辺の最後の項は消え，$p = \partial S/\partial x$, $E = -\partial S/\partial t$ を使うとニュートン力学のエネルギーの表式が得られる．他方，虚部からは，

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x}\left(A^2\frac{p}{m}\right)$$

が得られる．これは，ある場所の確率密度 $A^2 = |\Psi|^2$ の時間変化が，その場所に出入りする確率の流れの密度 $A^2\,p/m$ によって与えられるという確率の保存則を表している．

観測結果に結びつく量が波動関数そのものではなく，その絶対値の 2 乗であることから，波動関数は大きさが 1 の複素数 $e^{i\theta}$ (θ は任意の実定数) の任意性をもつことがわかる． 2 つの波動関数 $\Psi(x)$ と $\Psi(x)e^{i\theta}$ は同じ物理現象を記述するので，波動関数全体に掛かる定数の位相は任意に選んでよい．

1.3.2 多世界解釈

コペンハーゲン解釈は，観測過程を記述するために，次の 2 つの仮定をしている．

(1) 波束の収縮 (古典的測定器の存在).

(2) ボルンの確率解釈.

これらを仮定することなく，シュレーディンガー方程式だけで観測過程を記述するために，エベレットは，**多世界解釈**とよばれる観測過程の解釈を提案した[6)]．それによると，観測対象も測定器もそれを認識する観測者も，シュレーディンガー方程式と波動関数だけで記述されるものと考える．したがって，波束の収縮は起こらない．さらに，確率振幅の絶対値の 2 乗を観測者がそれぞれの事象を観測する頻度に比例する量，すなわち，相対頻度に比例することを「導く」ことができる．

簡単のため，系のとりうる状態が互いに直交する ϕ または ψ のいずれかであると仮定し，同じ波動関数

$$\Phi_i = \alpha\phi_i + \beta\psi_i, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \qquad (i = 1, 2, \cdots, N) \tag{1.28}$$

で記述される N 個の系を考えよう．ここで，下付きの添字 i は系を区別するためにつけた．全系の波動関数はこれらのテンソル積で与えられる．

$$\Psi = \prod_{i=1}^{N} (\alpha\phi_i + \beta\psi_i)\,. \tag{1.29}$$

右辺を展開すると 2^N 個の項が現れる．このうち，ϕ が n 回現れる状態は ${}_N\mathrm{C}_n = N!/(n!(N-n)!)$ 個あり，これらを集めたものを Ψ_n と書くと，

$$\Psi_n = \frac{1}{\sqrt{{}_N\mathrm{C}_n}}(\phi_1 \cdots \phi_n\psi_{n+1} \cdots \psi_N + \cdots + \psi_1 \cdots \psi_{N-n}\phi_{N-n+1} \cdots \phi_N) \tag{1.30}$$

6) H. Everett III, "Relative State" Formulation of Quantum Mechanics, Rev. Mod. Phys. **29**, 454 (1957).

が得られる．ここで，右辺の係数は波動関数が 1 に規格化されるように決められた．状態 Ψ_n を用いて (1.29) を展開すると，

$$\Psi = \sum_{n=0}^{N} c(n)\Psi_n, \qquad c(n) = \alpha^n \beta^{N-n} \sqrt{{}_N\mathrm{C}_n} \tag{1.31}$$

が得られる．これから，簡単な計算により

$$\sum_{n=0}^{N} \left(|\alpha|^2 - \frac{n}{N}\right)^2 |c(n)|^2 = \frac{|\alpha|^2|\beta|^2}{N} \tag{1.32}$$

が得られるが，右辺は $N \to \infty$ で 0 となる．これと

$$\sum_{n=0}^{N} |c(n)|^2 = (|\alpha|^2 + |\beta|^2)^N = 1 \tag{1.33}$$

から次の結果が導かれる．

$$\lim_{N\to\infty} |c(n)|^2 = \begin{cases} 1 & (n = N|\alpha|^2), \\ 0 & (n \neq N|\alpha|^2). \end{cases} \tag{1.34}$$

多世界理論では，状態 ϕ が観測される確率はそれが現れる相対頻度 n/N で与えられると解釈される．この比は，(1.34) より $N \to \infty$ の極限で $|\alpha|^2$ で与えられる．他方，ボルンの確率解釈によると，重ね合わせの状態 (1.28) に対して観測を行って状態 ϕ が得られる確率は $|\alpha|^2$ で与えられる．したがって，ボルンの確率解釈が，状態 ϕ が全系の波動関数の中に現れる相対頻度 n/N の $N \to \infty$ の極限として現れる．また，この議論においては，波束の収縮という概念が用いられておらず，可能なすべての状態が (1.31) のように重ね合わせの状態として共存している．

このように多世界解釈は，コペンハーゲン解釈において仮定された波束の収縮を必要とせず，また，確率解釈を「定理」として導けるという利点をもっている．他方，全系をシュレーディンガー方程式に従って時間発展させると，観測可能な複数の観測結果に対応して，観測者の状態もまた重ね合わせの状態にならざるをえない．これを理解するために，簡単のため測定対象の量子状態が $|i\rangle$ $(i = 1, 2)$ の 2 種類しかない場合を考え，対応する測定器およびそれを観測している観測者の状態を，それぞれ $|\,\text{測定器}\ i\rangle$，$|\,\text{観測者}\ i\rangle$ と書こう．すると，全系の状態は理想的には次のような重ね合わせの状態で書ける．

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle|\,\text{測定器}\ 0\rangle|\,\text{観測者}\ 0\rangle + \beta|1\rangle|\,\text{測定器}\ 1\rangle|\,\text{観測者}\ 1\rangle. \tag{1.35}$$

これは，観測者の状態もまた観測過程において重ね合わせの状態へと分岐することを意味している．このような結論は，我々の常識と鋭く対立する．にもかかわらず，それが論理的矛盾を引き起こさないようにできているところがこの理論の巧妙な点である．その理由は，シュレーディンガー方程式の線形性のために重ね合わされている各状態が独立に存在できるからである．すなわち，分岐した相手の存在を認識することができない．このことが多世界解釈の無矛盾性を保証している．

1.4 重ね合わせの原理

ボルンの確率解釈によれば，$|\Psi(x,t)|^2\,dx$ は時刻 t に粒子を x と $x+dx$ の間に見出す確率を与える．$|\Psi(x,t)|^2$ は観測結果と直接結びつく量であり，通常の確率の法則を満足する．量子論が古典論と異なる点は，最も基本的な量が確率ではなく確率振幅 (波動関数) だという点である．確率振幅は，シュレーディンガー方程式が線形なために重ね合わせの原理に従う．すなわち，Ψ_1 と Ψ_2 がシュレーディンガー方程式の解ならば，両者の任意の線形結合 $\alpha\Psi_1+\beta\Psi_2$ もまた解になっている．ここで，α と β は任意の複素数である．状態 1 と 2 の 2 つの状態しかとりえない古典系に対応する量子系は，両者の任意の線形結合という連続無限個の中間状態をとることができる．この中間状態は古典的には存在しないものであり，この自由度を使って情報処理をすることによって，古典的には不可能な可能性が開ける (第 7 章参照)．

1.5 オブザーバブル

1.2 節で，運動量やエネルギーといった物理量が，(1.7) のように微分演算子になることをみた．普通の数のように振る舞う古典的変数を **c-数**とよび，これと区別するために量子力学的変数を **q-数**とよぶ．一般に，物理量は**オブザーバブル**とよばれる演算子となる．いま，任意のオブザーバブル $\hat{O}$ をとり，その固有値と固有関数をそれぞれ O_n, Φ_n とすると，固有値方程式は次のように書ける．

$$\hat{O}\Phi_n = O_n\Phi_n. \tag{1.36}$$

ここで，固有関数 Φ_n は次のような正規直交条件を満足するように選ぶ．

$$\int \Phi_m^* \Phi_n \, dx = \delta_{mn}. \tag{1.37}$$

右辺の δ_{mn} は $m = n$ のとき 1，それ以外の場合は 0 なる値をとる**クロネッカーのデルタ**とよばれる記号である．固有値が無限空間での運動量のように連続値をとる場合は，右辺は**デルタ関数** (付録参照) となる．例えば，$\hat{p}\Phi_p(x) = p\Phi_p(x)$ を満足する運動量演算子 $\hat{p} = (\hbar/i)\, d/dx$ の固有関数

$$\Phi_p(x) = e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.38}$$

をとると，(A.14) と (A.9) から

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Phi_p^*(x)\Phi_{p'}(x)\, dx = 2\pi\hbar\delta(p - p') \tag{1.39}$$

が得られる．

演算子 $\hat{A}$ の**エルミート共役**な演算子 $\hat{A}^\dagger$ († はダガー (dagger) と読む) は，任意の波動関数 Φ, Ψ に対して，

$$\int \Phi^* \hat{A}^\dagger \Psi \, dx = \int (\hat{A}\Phi)^* \Psi \, dx = \int \Psi \hat{A}^* \Phi^* \, dx = \left(\int \Psi^* \hat{A} \Phi \right)^* \tag{1.40}$$

を満足するものとして定義される．積分 $\int \Psi^* \hat{A} \Phi \, dx$ を $\langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle$ のように**行列表示**すると (1.40) は，

$$\langle \Phi | \hat{A}^\dagger | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle^* \tag{1.41}$$

と書ける．このように，エルミート共役は，行列を転置して複素共役をとる操作に等しい．演算子 $\hat{A}$ の**転置** ${}^t\hat{A}$ は，任意の状態 Ψ, Φ に対して，

$$\langle \Phi | {}^t\hat{A} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{A} | \Phi \rangle \tag{1.42}$$

を満足するものと定義される．これを使うとエルミート共役は，

$$\hat{A}^\dagger = ({}^t\hat{A})^* \tag{1.43}$$

と書ける．条件 $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ を満足する演算子を**エルミート演算子**という．$\hat{A}^\dagger$ は古典量における複素共役に対応している (問題 1.2 参照)．エルミート演算子の固有値は実数であることが示される (問題 1.3 参照)．このことから，実数の物理量に対応するオブザーバブルは，エルミート演算子であると仮定される．エルミート共役の定義から

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \tag{1.44}$$

が導かれる．さらに，$\langle\psi| \equiv |\psi\rangle^\dagger$ と定義すると，$(\hat{A}|\psi\rangle)^\dagger = \langle\psi|\hat{A}^\dagger$ である．また，(1.37) の正規直交条件は，$\langle\Phi_m|\Phi_n\rangle = \delta_{mn}$ と書ける．

任意の状態ベクトル $|\phi\rangle$ に対して，常に $\langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle \geq 0$ を満足する演算子 $\hat{A}$ は**正値演算子**という．$\langle\phi|\hat{A}|\phi\rangle > 0$ を満足する場合は，$\hat{A}$ は**正確定**であるという．任意の正値演算子はエルミートである．実際，任意の演算子 $\hat{A}$ は次のようにエルミート演算子 $\hat{B}$ と $\hat{C}$ の線形和に分解できる．

$$\hat{A} = \frac{\hat{A}+\hat{A}^\dagger}{2} + i\frac{\hat{A}-\hat{A}^\dagger}{2i} \equiv \hat{B} + i\hat{C}. \tag{1.45}$$

問題 1.3 からエルミート演算子の固有値は実数なので，$\hat{A}$ が正値演算子であり，したがって，その固有値が実数であるためには $\hat{C}=0$ でなければならない．よって，$\hat{A}$ はエルミートである．

問題 1.2　$\hat{A}$ を任意の演算子とするとき，積分

$$\int \Psi^* \hat{A}^\dagger \hat{A}\Psi \, dx \tag{1.46}$$

の値は非負となることを示せ．

【解答】　エルミート演算子の性質より

$$\int \Psi^* \hat{A}^\dagger \hat{A}\Psi \, dx = \int (\hat{A}\Psi)^*(\hat{A}\Psi)\, dx = \int |\hat{A}\Psi|^2 \, dx \geq 0.$$ ∎

問題 1.3　エルミート演算子の固有値は実数であり，異なった固有値に属する固有関数は直交することを示せ．

【解答】　Φ_m, Φ_n をエルミート演算子 $\hat{O}$ の固有値 O_m, O_n に属する固有関数とすると，

$$\hat{O}\Phi_m = O_m\Phi_m, \qquad \hat{O}\Phi_n = O_n\Phi_n.$$

両辺の左側から，それぞれ Φ_n^*, Φ_m^* を掛けて積分すると，

$$\int \Phi_n^* \hat{O}\Phi_m \, dx = O_m \int \Phi_n^* \Phi_m \, dx, \tag{1.47}$$

$$\int \Phi_m^* \hat{O}\Phi_n \, dx = O_n \int \Phi_m^* \Phi_n \, dx. \tag{1.48}$$

(1.47) で $m=n$ とおき，$\hat{O}$ のエルミート性 $(\hat{O}^\dagger = \hat{O})$ を用いると，固有値が実数であることがわかる．すなわち，

$$O_n = \frac{\displaystyle\int \Phi_n^* \hat{O} \Phi_n \, dx}{\displaystyle\int |\Phi_n|^2 \, dx} = \frac{\displaystyle\int \Phi_n^* \hat{O}^\dagger \Phi_n \, dx}{\displaystyle\int |\Phi_n|^2 \, dx}$$

$$= \frac{\displaystyle\int (\hat{O}\Phi_n)^* \Phi_n \, dx}{\displaystyle\int |\Phi_n|^2 \, dx} = \frac{\left(\displaystyle\int \Phi_n^* \hat{O} \Phi_n \, dx\right)^*}{\displaystyle\int |\Phi_n|^2 \, dx}.$$

また，(1.48) の複素共役をとったものを $\hat{O}$ のエルミート性を用いて変形すると，

$$\text{左辺の複素共役} = \left(\int \Phi_m^* \hat{O} \Phi_n \, dx\right)^* = \left(\int (\hat{O}\Phi_m)^* \Phi_n \, dx\right)^*$$

$$= \int \Phi_n^* \hat{O} \Phi_m \, dx,$$

$$\text{右辺の複素共役} = O_n \int \Phi_m \Phi_n^* \, dx.$$

ここで，固有値 O_n が実数であることを使った．よって，

$$\int \Phi_n^* \hat{O} \Phi_m \, dx = O_n \int \Phi_n^* \Phi_m \, dx.$$

(1.47) からこの式を引くと，

$$0 = (O_m - O_n) \int \Phi_n^* \Phi_m \, dx$$

となるので，$O_n \neq O_m$ ならば $\int \Phi_n^* \Phi_m \, dx = 0$ である．したがって，異なる固有値に属する固有関数は直交している． ∎

問題 1.4 次の性質を満足する演算子 $\hat{U}$ は，**ユニタリー演算子**であるといわれる．

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}, \qquad \hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger. \tag{1.49}$$

ここで，$\hat{I}$ は**恒等演算子**である．ユニタリー演算子の固有値が $e^{i\theta}$ (θ は実数) と書けることを示せ．

【解答】 $\hat{U}$ の固有関数を Ψ，対応する固有値を A とすると，$\hat{U}\Psi = A\Psi$ である．両辺のエルミート共役をとった式 $\Psi^* \hat{U}^\dagger = A^* \Psi^*$ を左側から掛けて積分すると，

$$\int \Psi^* \hat{U}^\dagger \hat{U} \Psi \, dx = |A|^2 \int |\Psi|^2 \, dx.$$

左辺に (1.49) を適用すると，$|A|^2 = 1$ が得られるので，$A = e^{i\theta}$ と書けることがわかる． ∎

$\{|\phi_i\rangle\}$ は条件 $\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$ を満足するとき**正規直交基底**であるといわれる．任意のユニタリー演算子 $\hat{U}$ は内積を保存するので，$|\psi_i\rangle \equiv \hat{U}|\phi_i\rangle$ もまた正規

直交基底をなす．実際，

$$\langle\psi_i|\psi_j\rangle = \langle\phi_i|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\phi_j\rangle = \langle\phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$$

である．このとき，$\hat{U} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\phi_i|$ と書けることがわかる．逆に，任意の 2 つの完全系をなす正規直交基底 $\{|\phi_i\rangle\}$, $\{|\psi_i\rangle\}$ に対して，$\hat{U} = \sum_i |\psi_i\rangle\langle\phi_i|$ はユニタリー演算子である．

1 に規格化された $\left(\int|\Psi|^2\,dx = 1\right)$ 波動関数をエルミート演算子 $\hat{O}$ の固有関数系 $\{\Phi_n\}$ で展開する．

$$\Psi(x) = \sum_n a_n\Phi_n(x). \tag{1.50}$$

ここで，a_n は展開係数である．固有関数の正規直交性 (1.37) より

$$\sum_n |a_n|^2 = 1 \tag{1.51}$$

が得られる．(1.51) から，状態 (1.50) がおのおのの固有状態 Φ_n を確率振幅 a_n で重ね合わせたものであり，各状態の確率の重みが $|a_n|^2$ であると解釈できる．状態 (1.50) に対して次の量を考える．

$$\langle\hat{O}\rangle = \int \Psi^*\hat{O}\Psi\,dx = \sum_{m,n} a_m^* a_n \int \Phi_m^*\hat{O}\Phi_n\,dx = \sum_n |a_n|^2 O_n. \tag{1.52}$$

これは $\hat{O}$ の期待値を与えている．したがって，オブザーバブル $\hat{O}$ の 1 に規格化された任意の状態 Ψ に対する期待値は，$\hat{O}$ の左右からそれぞれ Ψ^*, Ψ を掛けた量を積分することによって得られることがわかる．

固有関数の正規直交性 (1.37) を使うと，

$$\begin{aligned}\phi_n(x) &= \sum_m \delta_{mn}\phi_m(x)\\ &= \sum_m \phi_m(x)\int \phi_m^*(y)\phi_n(y)\,dy\\ &= \int \phi_n(y)\sum_m \phi_m(x)\phi_m^*(y)\,dy.\end{aligned} \tag{1.53}$$

右辺の最後の項が $\phi_n(x)$ に等しくなるためには，

$$\sum_m \phi_m(x)\phi_m^*(y) = \delta(x-y) \tag{1.54}$$

が成立する必要がある．この関係式を**完全性条件**という．固有値 m が連続値をとる場合は，左辺の和は積分に置き換わる．

1.6 時間発展

状態の時間発展は，ハミルトニアンが時間に陽に依存しない場合は，シュレーディンガー方程式 (1.11) を形式的に解くことにより，

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\Psi(x,0) = \hat{U}(t)\Psi(x,0), \qquad \hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{1.55}$$

で与えられることがわかる．ここで，$\hat{U}(t)$ は**時間発展演算子**とよばれる．ハミルトニアンがエルミート演算子である ($\hat{H}^\dagger = \hat{H}$) ことから，$\hat{U}(t)$ は次の性質を満足するユニタリー演算子であることがわかる．

$$\hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{I}, \qquad \hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger. \tag{1.56}$$

ここで，$\hat{I}$ は恒等演算子である．シュレーディンガー方程式に従う系の時間発展は**ユニタリー**であるという．このとき，状態の内積は保存される．実際，エルミート共役の性質 (1.40) を使うと，

$$\begin{aligned}\int \Psi(x,t)^*\Phi(x,t)\,dx &= \int \left(\hat{U}(t)\Psi(x,0)\right)^* \hat{U}(t)\Phi(x,0)\,dx \\ &= \int \Psi(x,0)^*\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)\Phi(x,0)\,dx \\ &= \int \Psi(x,0)^*\Phi(x,0)\,dx \end{aligned} \tag{1.57}$$

となり，2 つの状態 Ψ と Φ の内積が時間的に一定であることがわかる．特に，$\Psi = \Phi$ の場合は，確率 $\displaystyle\int |\Psi|^2\,dx$ が保存されることがわかる．

1.7 ヒルベルト空間と状態ベクトルの表現

3 次元ベクトル空間における直交座標系の基底ベクトルを

$$|1\rangle \equiv \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}, \qquad |2\rangle \equiv \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}, \qquad |3\rangle \equiv \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix} \tag{1.58}$$

とおく．各ベクトルの転置ベクトルを $\langle 1| = (1,0,0)$, $\langle 2| = (0,1,0)$, $\langle 3| = (0,0,1)$ と書けば，

$$\sum_{i=1,2,3} |i\rangle\langle i| = \begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix} \equiv \hat{I}_3 \tag{1.59}$$

となることがわかる．ここで，$\hat{I}_3$ は 3 行 3 列の単位行列である．すべての基底 $(i = 1, 2, 3)$ についての $|i\rangle\langle i|$ の和が単位行列となるとき，基底ベクトル $|i\rangle$ $(i = 1, 2, 3)$ は 3 次元ベクトル空間の**完全系**をなすという．このとき，任意のベクトル

$$|A\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{bmatrix} \tag{1.60}$$

に対して $|A\rangle = \hat{I}|A\rangle$ が成立するので，これに (1.59) を代入すると，

$$|A\rangle = \sum_{i=1,2,3} |i\rangle\langle i|A\rangle = \sum_{i=1,2,3} a_i|i\rangle \tag{1.61}$$

が得られる．ここで，$a_i = \langle i|A\rangle$ はベクトル $|A\rangle$ と基底ベクトル $|i\rangle$ の内積であり，基底ベクトル $|i\rangle$ に対応するベクトル $|A\rangle$ の成分を表している．

量子力学系は，数学的には**ヒルベルト空間**によって記述される[7]．ヒルベルト空間は内積が定義された状態ベクトルから構成される空間である．具体的には，成分が一般に複素数でその絶対値の 2 乗の和が収束する有限個あるいは無限個の成分をもつベクトルの空間で，次の条件を満足する．

- 線形性: $\langle\psi|\left(\sum_i \lambda_i|\phi_i\rangle\right) = \sum_i \lambda_i\langle\psi|\phi_i\rangle$.
- 双対性: $\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*$.
- ノルムの正値性: $\langle\psi|\psi\rangle \geq 0$．等号が成立するのは $|\psi\rangle = 0$ のときのみ.

ヒルベルト空間の基底ベクトルを上記の 3 次元ベクトル空間の例にならって

$$|1\rangle,\ |2\rangle, \cdots,\ |N\rangle \tag{1.62}$$

と書こう．ここで，N はヒルベルト空間の次元であり，有限でも無限でもよい．基底ベクトルの正規直交性は，

$$\langle i|j\rangle = \delta_{ij} \tag{1.63}$$

と書ける．また，完全性条件は，

$$\sum_{i=1}^{N} |i\rangle\langle i| = \hat{I}_N \tag{1.64}$$

---

7) ヒルベルト空間のより詳しい解説としては，例えば，朝永振一郎「角運動量とスピン」(みすず書房)，フォン・ノイマン (著)，井上 健 (訳)「量子力学の数学的基礎」(みすず書房).

と書ける．ここで，$\hat{I}_N$ は N 次元ヒルベルト空間の恒等演算子 (N 行 N 列の単位行列) である．

量子力学系の状態は，ヒルベルト空間の単位ベクトル $|\Psi\rangle$ が対応している．単位ベクトルとは，自分自身との内積が 1 に等しい ($\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$) ベクトルである．$|\Psi\rangle$ は**ブラベクトル**，$\langle\Psi|$ は**ケットベクトル**とよばれる．(1.64) を使って $|\Psi\rangle$ を基底ベクトル系 $\{|i\rangle\}$ で展開すると，

$$|\Psi\rangle = \hat{I}_N|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} |i\rangle\langle i|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i|i\rangle, \qquad a_i = \langle i|\Psi\rangle. \tag{1.65}$$

$|\Psi\rangle$ が単位ベクトルであるという要請から状態ベクトルの成分 a_i は，

$$\sum_{i=1}^{N} |a_i|^2 = 1 \tag{1.66}$$

を満たすことがわかる．状態の時間変化は展開係数の時間変化として与えられる．このとき，(1.65) に対応して，

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^{N} a_i(t)|i\rangle \tag{1.67}$$

が得られる．このように系の状態の時間依存性を状態ベクトルの時間変化で記述する表示を**シュレーディンガー表示**という．これに対して，時間依存性を演算子の時間変化で記述する表示を**ハイゼンベルク表示**という．これについては次節で述べる．

基底ベクトルに対応する量は座標表示の場合は $\{|x\rangle\}$，運動量表示の場合は $\{|p\rangle\}$ と書かれる．これらは，それぞれ座標演算子と運動量演算子の固有状態の完全系を構成している．波動関数 $\Psi(x,t)$ は，状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の座標表示とみなすことができる．実際，座標が連続値をとることから (1.61) に対応する表式は，

$$|\Psi(t)\rangle = \int dx\ |x\rangle\langle x|\Psi(t)\rangle \tag{1.68}$$

と積分形で書かれる．これは，座標演算子の固有状態 $\{|x\rangle\}$ を基底にとった場合の状態ベクトルの表現である．右辺に現れる $\langle x|\Psi(t)\rangle$ は，$\{|x\rangle\}$ を基底にとった場合のベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の座標の役割を果たす[8)]．これが，座標表示の波動関数 $\Psi(x,t)$ である．すなわち，

8) ここでいう「座標」は，導入された座標軸の単位ベクトル $|x\rangle$ への状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の射影 (内積) $\langle x|\Psi(t)\rangle$ を意味するヒルベルト空間における抽象的な座標であり，実空間の座標と混同してはならない．

$$\Psi(x,t) \equiv \langle x|\Psi(t)\rangle. \tag{1.69}$$

(1.68) の両辺を比較すると，(1.59) に対応して，$\int dx\ |x\rangle\langle x|$ が恒等演算子 $\hat{I}$ でなければならないことがわかる．

$$\int dx\ |x\rangle\langle x| = \hat{I}. \tag{1.70}$$

これは，基底ベクトル $\{|x\rangle\}$ が完全系をなしていることの数学的表現である．

同様に，運動量演算子の固有状態 $\{|p\rangle\}$ を基底にとった場合の状態ベクトルの表現は，

$$|\Psi(t)\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p|\Psi(t)\rangle \tag{1.71}$$

と書かれる．$\langle p|\Psi(t)\rangle$ が運動量表示の波動関数 $\tilde{\Psi}(p,t)$ である．(1.71) の右辺の定数 $2\pi\hbar$ は便宜上導入した因子で，これに対応して完全性条件の式は，

$$\int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p| = \hat{I} \tag{1.72}$$

となる．

基底 $|p\rangle$ は，定義により運動量演算子 $\hat{p} = (\hbar/i)\, d/dx$ の固有状態であるから，$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle$ が成立する．これと $\langle x|$ との内積をとると，

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x|p\rangle = p\langle x|p\rangle. \tag{1.73}$$

これから，

$$\langle x|p\rangle = (\langle p|x\rangle)^* = e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.74}$$

が得られる．$\langle x|p\rangle$ は，2 つの基底 $|x\rangle$ と $|p\rangle$ をつなぐ**変換関数**とよばれる．

$|x\rangle$ の左側から完全系の式 (1.72) を作用させ (1.74) を代入すると，

$$|x\rangle = \hat{I}|x\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle\langle p|x\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}|p\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.75}$$

が得られる．このように，座標表示の基底と運動量表示の基底は互いにフーリエ変換で結ばれている．(1.75) に共役な式

$$\langle x| = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\langle p|e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.76}$$

と $|\Psi(t)\rangle$ との内積をとると，

$$\Psi(x,t) = \langle x|\Psi(t)\rangle = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\langle p|\Psi(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}px} = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\tilde{\Psi}(p,t)e^{\frac{i}{\hbar}px} \tag{1.77}$$

が得られ，座標表示の波動関数 $\Psi(x,t)$ と運動量表示の波動関数 $\tilde{\Psi}(p,t) \equiv \langle p|\Psi(t)\rangle$ もまた互いにフーリエ変換で結ばれていることがわかる．

1.8 ハイゼンベルクの運動方程式

状態 $|\Psi(t)\rangle$ に対するオブザーバブル $\hat{O}$ の期待値 $\langle\Psi(t)|\hat{O}|\Psi(t)\rangle$ を考えよう．状態の時間発展は (1.55) で与えられるので，

$$\langle\Psi(t)|\hat{O}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{O}(t)|\Psi(0)\rangle \qquad (1.78)$$

と書き換えることができる．ここで，$\hat{O}(t)$ は，

$$\hat{O}(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{O}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \qquad (1.79)$$

と定義される．このように，時間依存性を演算子にもたせることができる．これを**ハイゼンベルク表示**という．ハイゼンベルク表示における状態ベクトル $|\Psi_{\rm H}\rangle$ は時間に依存せず，$t=0$ でのシュレーディンガー表示の状態ベクトルに等しい．

$$|\Psi_{\rm H}\rangle \equiv |\Psi(t=0)\rangle. \qquad (1.80)$$

これに対して，前節で述べたように状態が時間依存性を記述する表示をシュレーディンガー表示という．

シュレーディンガー表示では，状態がシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \qquad (1.81)$$

に従って時間発展するのに対して，ハイゼンベルク表示では，(1.79) から演算子が次のように時間発展することがわかる．

$$\frac{d}{dt}\hat{O}(t) = \frac{i}{\hbar}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}(\hat{H}\hat{O}-\hat{O}\hat{H})e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} = \frac{i}{\hbar}(\hat{H}\hat{O}(t)-\hat{O}(t)\hat{H}).$$

任意の演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の**交換子**を

$$[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A} \qquad (1.82)$$

で定義すると，演算子の時間発展は方程式

$$\frac{d}{dt}\hat{O}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H},\hat{O}(t)] \qquad (1.83)$$

に従って記述される．これを**ハイゼンベルクの運動方程式**という．

1.9 相互作用表示

ハミルトニアンが $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ のように2つの部分に分解でき，$\hat{H}_0$ だけが存在するときのシュレーディンガー方程式が，比較的簡単に解くことができる場合を考えよう．このとき，**相互作用表示**とよばれる表示がしばしば有用である．相互作用表示では，状態ベクトルもオブザーバブルもともに時間に依存する．まず，状態ベクトル $|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle$ は，シュレーディンガー表示の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ を用いて，

$$|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi(t)\rangle \tag{1.84}$$

と定義される．これを逆に解いた $|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle$ をシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V})|\Psi(t)\rangle \tag{1.85}$$

に代入すると，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = \hat{V}_{\mathrm{I}}(t)|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle \tag{1.86}$$

が得られる．ここで，$\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ は，

$$\hat{V}_{\mathrm{I}}(t) \equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \tag{1.87}$$

で定義され，運動方程式

$$\frac{d}{dt}\hat{V}_{\mathrm{I}}(t) = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}_0, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t)] \tag{1.88}$$

に従う．$t = 0$ における状態ベクトルはすべての表示で一致する．

$$|\Psi_{\mathrm{I}}(0)\rangle = |\Psi_{\mathrm{H}}\rangle = |\Psi(0)\rangle. \tag{1.89}$$

演算子 $\hat{V}_{\mathrm{I}}(t)$ の時間依存性は，ハミルトニアンの簡単に解ける部分 (「自由な部分」ともよばれる) $\hat{H}_0$ のみに依存しており，しばしば簡単に求めることができる．他方，状態ベクトルの時間発展を記述する方程式 (1.86) は，両辺を積分することにより次のように逐次的に解くことができる．

$$|\Psi_{\mathrm{I}}(t)\rangle = |\Psi_{\mathrm{I}}(0)\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1\, \hat{V}_{\mathrm{I}}(t_1)|\Psi_{\mathrm{I}}(t_1)\rangle$$

$$
\begin{aligned}
&=|\Psi_{\rm I}(0)\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt_1\, \hat{V}_{\rm I}(t_1)|\Psi_{\rm I}(0)\rangle \\
&\quad + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2\, \hat{V}_{\rm I}(t_1)\hat{V}_{\rm I}(t_2)|\Psi_{\rm I}(t_2)\rangle \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \\
&\quad \times \hat{V}_{\rm I}(t_1)\hat{V}_{\rm I}(t_2)\cdots\hat{V}_{\rm I}(t_n)|\Psi_{\rm I}(0)\rangle. \qquad (1.90)
\end{aligned}
$$

一般に，異なった時刻の $\hat{V}_{\rm I}(t)$ は交換しない $(\hat{V}_{\rm I}(t)\hat{V}_{\rm I}(t') \neq \hat{V}(t')\hat{V}(t))$ ので，(1.90) の演算子の順序を変えることはできない．しかし，**時間順序演算子** T を

$$
T\{\hat{A}(t)\hat{B}(t')\} = \begin{cases} \hat{A}(t)\hat{B}(t') & (t \geq t'), \\ \hat{B}(t')\hat{A}(t) & (t < t') \end{cases} \qquad (1.91)
$$

で定義すると，(1.90) は次のように簡潔に書くことができる．

$$
\begin{aligned}
|\Psi_{\rm I}(t)\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \cdots \int_0^t dt_n \\
&\quad \times T\{\hat{V}_{\rm I}(t_1)\hat{V}_{\rm I}(t_2)\cdots\hat{V}_{\rm I}(t_n)\}|\Psi_{\rm I}(0)\rangle \\
&= T\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\, \hat{V}_{\rm I}(t')\right)|\Psi(0)\rangle. \qquad (1.92)
\end{aligned}
$$

1.10 不確定性関係

1.10.1 ハイゼンベルクの不確定性関係

アインシュタイン–ド・ブロイの関係式から，運動量が位置に関する微分演算子となることを述べたが ((1.5) 参照)，ここでは，それから導かれる物理的帰結を考察しよう．(1.5) を (1.7) を使って書くと，

$$
\hat{p}\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\Psi = p\Psi. \qquad (1.93)
$$

これを演算子 $\hat{p}$ に対する固有方程式とみなせば，Ψ は固有値 p に対応する固有関数であることがわかる．すなわち，状態 Ψ に対して運動量を測定すると必ず測定値 p が得られる．(1.93) を解くことで対応する固有関数が平面波

$$
\Psi_p(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar}px} \qquad (1.94)
$$

であることがわかる．ここで，C は定数である．この状態で記述される粒子が，位置 x で見出される確率密度 $|\Psi_p(x)|^2 = |C|^2$ は一定で，場所に依存しない．したがって，運動量が確定した状態では位置は全く不確定である．同様に，位置が確定した状態の運動量は全く不確定である．実際，位置が x_0 に確定した状態 $\Psi_{x_0}(x) = \delta(x - x_0)$ に対する運動量表示の波動関数 $\tilde{\Psi}_{x_0}(p)$ は，(1.77) から

$$\tilde{\Psi}_{x_0}(p) = \int \tilde{\Psi}_{x_0}(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px}\, dx = e^{-\frac{i}{\hbar}px_0}$$

となり，運動量分布 $|\tilde{\Psi}_{x_0}(p)|^2$ は p に依存しなくなる．このように，古典力学と異なり，量子力学では位置と運動量は同時に決まった値をとることができない．

位置と運動量のとりうる値の不確かさを表す量として，次のような標準偏差を導入する．

$$\Delta x \equiv \sqrt{\langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2}, \qquad \Delta p \equiv \sqrt{\langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2}. \tag{1.95}$$

ここで，記号 $\langle \hat{O} \rangle$ はオブザーバブル $\hat{O}$ の期待値

$$\langle \hat{O} \rangle \equiv \int \Psi^*(x) \hat{O} \Psi(x)\, dx \tag{1.96}$$

を表すものとする．具体例として，Δx, Δp を波動関数がガウス関数

$$\Psi(x) = \left(\frac{1}{\pi d^2} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{x^2}{2d^2}} \tag{1.97}$$

の場合に計算しよう．波動関数 (1.97) は偶関数なので，$\langle \hat{x} \rangle = \langle \hat{p} \rangle = 0$．また，積分公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha x^2}\, dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\alpha x^2}\, dx = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$$

を使うと，

$$\langle \hat{x}^2 \rangle = \left(\frac{1}{\pi d^2} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{d^2}}\, dx = \left(\frac{1}{\pi d^2} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2} \left(\pi d^6 \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{d^2}{2},$$

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \left(\frac{1}{\pi d^2} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{x^2}{2d^2}} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \right) e^{-\frac{x^2}{2d^2}}\, dx = \frac{\hbar^2}{2d^2}.$$

よって，

$$\Delta x = \frac{d}{\sqrt{2}}, \qquad \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}d}, \tag{1.98}$$

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2} \tag{1.99}$$

が成立することがわかる．(1.98) から位置の揺らぎ Δx を小さくするために d を小さくすると，運動量の揺らぎ Δp が大きくなり，またその逆も成り立つことがわかる．

以下に示すように，一般に不等式

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1.100}$$

が成立する．これは位置と運動量に関する**ハイゼンベルクの不確定性関係**とよばれ，粒子の位置と運動量の揺らぎの積に原理的な下限を与える．特に，等式が成立する状態を**最小不確定状態**という．ガウス型の波動関数 (1.97) は最小不確定状態の一例となっている．

(1.100) の一般的な証明は次のようになされる．任意の関数 $f(x)$ に $\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}$ を作用させ (1.7) を使うと，

$$\begin{aligned}(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x})f(x) &= \hat{x}\frac{\hbar}{i}\frac{df(x)}{dx} - \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}(xf) \\ &= \frac{\hbar}{i}\left[x\frac{df}{dx} - \left(x\frac{df}{dx}+f\right)\right] \\ &= i\hbar f(x).\end{aligned}$$

これが任意の関数 $f(x)$ に対して成立するので，

$$\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x} = i\hbar \tag{1.101}$$

が成立する．$\hbar \to 0$ なる極限をとると，$\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}$ の差は 0 となり古典論の結果と一致する．これは，$\hbar$ を 0 とする極限をとることにより，量子論は古典論へと移行することを意味している[9]．(1.101) は，位置演算子と運動量演算子の**交換関係**とよばれ，(1.82) で定義した交換子を用いると，

$$[\hat{x},\hat{p}] = i\hbar \tag{1.102}$$

と書ける．

さて，位置および運動量のオブザーバブルからその期待値を引いた演算子

$$\Delta\hat{x} \equiv \hat{x} - \langle\hat{x}\rangle, \qquad \Delta\hat{p} \equiv \hat{p} - \langle\hat{p}\rangle \tag{1.103}$$

---

9)　アインシュタイン－ド・ブロイの関係式 (1.1) で $\hbar \to 0$ なる極限をとると，p も E も 0 となってしまう．正しい極限操作は，$\hbar$ を 0 とすると同時に，k を積 $\hbar k$ を一定に保ちつつ無限大にすることである．これは，波の波長 $\lambda = 2\pi/k$ が 0 となる**幾何光学**の極限をとることに対応している．

とそれらの線形結合で表される演算子

$$\hat{A} \equiv t\Delta\hat{x} - i\Delta\hat{p} \tag{1.104}$$

を定義する．このとき，$\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle = \langle\hat{x}^2\rangle - \langle\hat{x}\rangle^2 = (\Delta x)^2$，$\langle(\Delta\hat{p})^2\rangle = \langle\hat{p}^2\rangle - \langle\hat{p}\rangle^2 = (\Delta p)^2$ が成立することに注意しよう．問題 1.2 より $\langle\hat{A}^\dagger\hat{A}\rangle$ は非負なので，これに (1.104) を代入すると，任意の実数 t に対して次の不等式が成立することがわかる．

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}^\dagger\hat{A}\rangle &= \langle(t\Delta\hat{x} + i\Delta\hat{p})(t\Delta\hat{x} - i\Delta\hat{p})\rangle \\ &= t^2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle + it\langle\Delta\hat{p}\Delta\hat{x} - \Delta\hat{x}\Delta\hat{p}\rangle + \langle(\Delta\hat{p})^2\rangle \\ &= t^2\langle(\Delta\hat{x})^2\rangle + it\langle\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}\rangle + \langle(\Delta\hat{p})^2\rangle \\ &= t^2(\Delta x)^2 + \hbar t + (\Delta p)^2 \geq 0.\end{aligned}$$

これが，任意の実数 t で成立するためには，判別式 D は 0 または負でなければならない．すなわち，

$$D = \hbar^2 - 4(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \leq 0.$$

こうして，ハイゼンベルクの不確定性関係 (1.100) が証明された．

問題 1.5 質量が m，周波数が ω で振動する 1 次元調和振動子のハミルトニアン $\hat{H}$ は，次のように書かれる．

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}. \tag{1.105}$$

位置と運動量の間の不確定性関係 (1.100) を使って，調和振動子のエネルギーの最小値が $\hbar\omega/2$ となることを示せ．このように，不確定性関係のために調和振動子のエネルギーは 0 となることはできない．$\hbar\omega/2$ は調和振動子の**零点エネルギー**とよばれる．

【解答】 系のエネルギー E は，ハミルトニアンの量子力学的期待値で与えられる．

$$E \equiv \langle\hat{H}\rangle = \frac{\langle\hat{p}^2\rangle}{2m} + \frac{m\omega^2\langle\hat{x}^2\rangle}{2}. \tag{1.106}$$

$\langle\hat{x}\rangle = 0$, $\langle\hat{p}\rangle = 0$ なので，$\langle\hat{x}^2\rangle = \langle(\hat{x} - \langle\hat{x}\rangle)^2\rangle \equiv (\Delta x)^2$, $\langle\hat{p}^2\rangle = \langle(\hat{p} - \langle\hat{p}\rangle)^2\rangle \equiv (\Delta p)^2$ とおくと (1.106) は，

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} + \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2} \tag{1.107}$$

と書かれる．右辺で相加平均は相乗平均以上であることを使うと不等式

$$E \geq 2\sqrt{\frac{(\Delta p)^2}{2m}\frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2}} = \omega \Delta p \Delta x \tag{1.108}$$

が成立することがわかる．これに不確定性関係 (1.100) を適用すると，エネルギーの最小値が $\hbar\omega/2$ で与えられることがわかる．■

(1.108) で等号が満足される最低エネルギー状態を**基底状態**という．この状態は，

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{m\omega^2(\Delta x)^2}{2} = \frac{\hbar\omega}{4} \tag{1.109}$$

を満足する．これを (1.98) と比較すると，基底状態の波動関数が (1.97) で $d = \sqrt{\hbar/m\omega}$ とおいた状態であることがわかる．すなわち，

$$\Psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}. \tag{1.110}$$

ここで，d は調和振動子の基底状態の波動関数の広がりの程度を特徴づける長さである．一般には，$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ である．不確定性関係があるために，粒子は $x = 0$ で静止することはできない．これが，零点エネルギーの物理的起源である．

問題 1.6　水素原子のまわりを回る電子が，電磁波を放出して中心へ落下してしまわないのはなぜかを説明せよ．

【解答】　水素原子は陽子と電子からなっている．陽子の質量は電子の質量の約 2000 倍もあるので静止していると考えてよいので，陽子の運動エネルギーは無視できる．このとき全系のハミルトニアン $\hat{H}$ は，電子の運動エネルギー $\hat{p}^2/2m$ と電子と陽子の間に働くクーロン・エネルギー $-e^2/4\pi\epsilon_0 r$ の和で与えられる．

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

電子は陽子に束縛されているので，$\hat{p}$ の期待値は 0 である．そこで，ハミルトニアンの期待値を見積るために，右辺の $\hat{p}^2$ と r をそれぞれ電子の運動量の分散 $(\Delta p)^2$ と位置の広がり Δx で置き換えると，

$$E = \frac{(\Delta p)^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \Delta x}.$$

右辺に不確定性関係 $\Delta p \geq \hbar/2\Delta x$ を適用すると，

$$E \geq \frac{\hbar^2}{8m(\Delta x)^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \Delta x} = \frac{\hbar^2}{8m}\left[\frac{1}{\Delta x} - \frac{me^2}{\pi\epsilon_0\hbar^2}\right]^2 - \frac{me^4}{8\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}$$

が得られる．電子は電磁波を放出してエネルギーができるだけ低い状態になろうとするが，不確定性関係のために，電子の軌道の大きさは $\Delta x = \pi\epsilon_0\hbar^2/me^2$ より小

さくなることはできず，それゆえ電子は中心へと落下できない．また，このとき系は，最低エネルギー $E=-me^4/8\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2$ の状態をとる． ∎

以上は，定性的な議論であるが，より定量的な議論の結果も定数倍しか違わないことが確かめられる．それによると，水素原子の最低エネルギー状態の電子軌道の半径は，

$$a_{\mathrm{B}}=\frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}\simeq 0.529\text{Å} \tag{1.111}$$

で与えられ，**ボーア半径**とよばれる．また，そのときの電子の束縛エネルギー

$$E_{\mathrm{Ry}}=\frac{me^4}{32\pi^2\epsilon_0^2\hbar^2}=\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_{\mathrm{B}}}\simeq 13.6\mathrm{eV} \tag{1.112}$$

を**リュードベリ定数**という．1 エレクトロンボルト (eV) $\simeq 1.6\times 10^{-19}$J は，電子を 1 ボルトだけ電位の高いところに運ぶために必要なエネルギーである．上記の議論は，原子の大きさがなぜ 1Å $=10^{-10}$m のオーダーであり，エレクトロニクスのエネルギースケールがなぜ eV であるのかを説明している．すなわち，これらはクーロン・ポテンシャルと不確定性関係のつりあいの結果である．

不確定性関係の物理的意味

不確定性関係 $\Delta x\Delta p\geq\hbar/2$ を実験的に検証する方法を考察することにより，その物理的意味を考察しよう．不等式 (1.100) は，数学的には任意の与えられた波動関数 $\Psi(x)$ に対して位置の標準偏差 Δx を計算し，同じ波動関数に対して運動量の標準偏差 Δp を計算する．すると，両者の積は常に $\hbar/2$ よりも大きくなるという主張である．これは次のようにして実験的に検証できる．

同一の波動関数 Ψ で記述される系を $2N$ 個準備する．まず，その半分の N 個の系のそれぞれに対して位置を正確 (すなわち測定誤差なしで) に測定し，測定結果 $x_1,x_2,\cdots,x_N$ が得られたとしよう．これらの測定データから計算された標準偏差を $(\Delta x)_N$ とすると，この量は N が無限大の極限で波動関数を使って計算された標準偏差 Δx に収束する．同様にして，残りの半分の N 個の系に対して，運動量を正確に測定して得られた測定結果 $p_1,p_2,\cdots,p_N$ から計算される標準偏差 $(\Delta p)_N$ は，N が無限大の極限で波動関数から計算された Δp に収束する．

$$\lim_{N\to\infty}(\Delta x)_N=\Delta x,\qquad \lim_{N\to\infty}(\Delta p)_N=\Delta p. \tag{1.113}$$

そして，両者の積 $(\Delta x)_N(\Delta p)_N$ は，同じ極限で $\hbar/2$ 以上となる．位置や運動量を測定誤差なしに測定しても毎回測定結果がばらつくのは，測定される系 — 被測定系 — の波動関数が広がっている結果である．これが，ハイゼンベルクの不確定性関係の物理的意味である．

ハイゼンベルクの不確定性関係が被測定系の波動関数の性質のみで決まり，測定過程に依存しないのは，位置と運動量をそれぞれ同一の波動関数で記述される別々の系に対して測定した場合にのみあてはまる．このことをより深く理解するために次のような測定を考えよう．

系に対して，まず位置を測定して測定値 x_1' が得られたとして，その直後に同じ系に対して引き続き運動量を測定し，測定値 p_1' が得られたとしよう．同様の操作を同じ波動関数 Ψ で記述される N 個の系に対して実行し，その結果得られる測定データを $x_1', x_2', \cdots, x_N'$，$p_1', p_2', \cdots, p_N'$ とする．そして，これらから計算された位置と運動量の標準偏差を，それぞれ $(\Delta x')_N, (\Delta p')_N$ と書こう．このとき，N が無限大の極限で，前者は波動関数 Ψ から計算された位置の標準偏差 Δx に収束するが，後者は同じ Ψ を用いて計算された運動量の標準偏差 Δp には収束しない．

$$\lim_{N\to\infty}(\Delta x')_N = \Delta x, \qquad \lim_{N\to\infty}(\Delta p')_N \neq \Delta p. \tag{1.114}$$

その理由は，位置を測定した後の波動関数は測定の反作用を受けるために，Ψ とは異なった状態になっているからである．この場合，不確定積 $(\Delta x')_N(\Delta p')_N$ が $N\to\infty$ の極限でどのような値をとるかは，観測過程の詳細に依存する．同様に，最初に運動量を測定してその直後に同じ系に対して位置を測定することから得られる量 $(\Delta p'')_N, (\Delta x'')_N$ については，$N\to\infty$ で前者は Δp に収束するが，後者は Δx には収束しない．さらに，一般には，

$$\lim_{N\to\infty}(\Delta x')_N(\Delta p')_N \neq \lim_{N\to\infty}(\Delta x'')_N(\Delta p'')_N \tag{1.115}$$

である．これは，被測定系が受ける測定の反作用が位置を最初に測定する場合と運動量を最初に測定する場合で異なっているからである．

古典論では，被測定系が受ける測定の反作用は原理的にはいくらでも小さくできることを思い出そう．これに対して量子論では，系に影響を与えずに測定することはできず，測定行為そのものが観測結果を生むうえで本質的な役割を果たす．

1.10.2 非可換観測量の同時測定

不確定性関係は，ハイゼンベルクがガンマ線顕微鏡により電子の位置と運動量を同時に測定するという思考実験を分析ことにより発見された．それによると，測定前の電子の位置と運動量が決まっていても，測定結果は (1.100) で決まる不確定性をもつというものであった．ここでいう不確定性は，被測定系 (電子) が本来もっているものではなく，測定器 (ガンマ線顕微鏡) のもつ不確定性である．しかし，現実には，測定系 (測定器) も被測定系 (電子) もともに量子力学に従っているので，観測結果には被測定系のもつ不確定性と測定器のもつ不確定性の両者が影響を与えるはずである．(1.114), (1.115) は，このことの帰結であると考えられる．特に，電子[10)]の位置と運動量を**同時測定**すると，電子の不確定性と測定器の不確定性の両方が結果に影響し，不確定性の大きさはある仮定 (後述) のもとで，(1.100) の 2 倍 (すなわち $\Delta x \Delta p \geq \hbar$) となる[11)]．これは，次のような考察により理解できる．

電子の位置 $\hat{x}$ と運動量 $\hat{p}$ を同時に測定するために，位置を測定する測定器 1 と運動量を測定する測定器 2 を考え，測定器 1 のオブザーバブルを $\hat{A}$，測定器 2 のオブザーバブルを $\hat{B}$ とする．一般に，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ は，それぞれ $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の関数である．

$$\hat{A} = f(\hat{x}), \qquad \hat{B} = g(\hat{p}). \tag{1.116}$$

オブザーバブル $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が交換しなければ，それらが状態に作用する順序によって結果が変わってしまうので，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ が同時に測定できるためには，両者は交換しなければならない．

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = 0. \tag{1.117}$$

この条件が成立すれば，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の両方の固有状態である**同時固有状態**が存在する．測定は，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の測定結果が，それぞれそのまま $\hat{x}$ と $\hat{p}$ の情報を与えるものが理想的なので，条件

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \hat{x} \rangle, \qquad \langle \hat{B} \rangle = \langle \hat{p} \rangle \tag{1.118}$$

---

10) ここでは便宜上電子とよぶが，質量をもつ他の粒子であっても同じ結果が得られる．ただし，質量をもたない粒子は空間的に局在しないので，本節の議論をそのまま当てはめることはできない．

11) E. Arthurs and J. L. Kelly, Jr., Bell. Syst. Tech. J. **44**, 725 (1965); E. Arthurs and M. S. Goodman, Phys. Rev. Lett. **60**, 2447 (1988); Y. Yamamoto and H. A. Haus, Rev. Mod. Phys. **58**, 1001 (1986).

を要請しよう．この条件は，$\hat{A}=\hat{x}$，$\hat{B}=\hat{p}$ とおけば満たされるが，このとき $[\hat{A},\hat{B}]=[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ となり，同時測定可能の条件 (1.117) と矛盾する．条件 (1.117) と (1.118) を同時に満足する最も簡単な関数形は，

$$\hat{A}=\hat{x}+\hat{X}, \qquad \hat{B}=\hat{p}+\hat{Y} \tag{1.119}$$

である．このとき，条件 (1.118) を満足させるためには，

$$\langle\hat{X}\rangle=\langle\hat{Y}\rangle=0 \tag{1.120}$$

を要請すればよい．また，条件 (1.117) から，

$$\begin{aligned}[\hat{A},\hat{B}]&=[\hat{x}+\hat{X},\hat{p}+\hat{Y}]\\&=[\hat{x},\hat{p}]+[\hat{X},\hat{Y}]+[\hat{x},\hat{Y}]+[\hat{X},\hat{p}]=0\end{aligned} \tag{1.121}$$

であることがわかる．被測定系 (電子) と測定系 (測定器) の演算子が独立であることを仮定すると，

$$[\hat{x},\hat{Y}]=[\hat{X},\hat{p}]=0 \tag{1.122}$$

が成立する．したがって，(1.121) より

$$[\hat{X},\hat{Y}]=-[\hat{x},\hat{p}]=-i\hbar \tag{1.123}$$

が得られる．これから，

$$\Delta X\Delta Y\geq\frac{\hbar}{2} \tag{1.124}$$

が成立することがわかる．(1.119) より $\hat{A}$, $\hat{B}$ の分散は，$\Delta\hat{A}\equiv\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle$, $\Delta\hat{B}\equiv\hat{B}-\langle\hat{B}\rangle$ とおくと，

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2&\equiv\langle(\Delta\hat{A})^2\rangle\\&=\langle[\Delta(\hat{x}+\hat{X})]^2\rangle\\&=\langle(\Delta\hat{x})^2+(\Delta\hat{X})^2+\Delta\hat{x}\Delta\hat{X}+\Delta\hat{X}\Delta\hat{x}\rangle,\end{aligned} \tag{1.125}$$

$$\begin{aligned}(\Delta B)^2&\equiv\langle(\Delta\hat{B})^2\rangle\\&=\langle[\Delta(\hat{p}+\hat{Y})]^2\rangle\\&=\langle(\Delta\hat{p})^2+(\Delta\hat{Y})^2+\Delta\hat{p}\Delta\hat{Y}+\Delta\hat{Y}\Delta\hat{p}\rangle\end{aligned} \tag{1.126}$$

となる．さらに，測定系と被測定系の物理量の揺らぎに相関がないものと仮定しよう．すなわち，

$$\langle \Delta\hat{x}\Delta\hat{X} + \Delta\hat{X}\Delta\hat{x} \rangle = 0, \tag{1.127}$$

$$\langle \Delta\hat{p}\Delta\hat{Y} + \Delta\hat{Y}\Delta\hat{p} \rangle = 0. \tag{1.128}$$

このとき，

$$\begin{aligned}(\Delta A)^2(\Delta B)^2 &= \langle (\Delta\hat{x})^2 + (\Delta\hat{X})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{p})^2 + (\Delta\hat{Y})^2 \rangle \\ &= (\Delta x)^2(\Delta p)^2 + (\Delta x)^2(\Delta Y)^2 + (\Delta X)^2(\Delta p)^2 + (\Delta X)^2(\Delta Y)^2 \\ &\geq 4\Delta x\Delta p\Delta X\Delta Y \geq \hbar^2.\end{aligned}$$

こうして，

$$\Delta A\Delta B \geq \hbar \tag{1.129}$$

が得られる．これを (1.100) と比較すると，不確定積の下限が 2 倍になっていることがわかる．

(1.129) を導出する際には (1.127) と (1.128) が仮定されたが，もし，これらの式の左辺が負となるような測定ができれば，今度は (1.129) の左辺の不確定積の下限を $\hbar/2$ よりも小さくすることもできる．そのような測定を記述するハミルトニアンを構成することは可能で，重力波のような極微小の信号の検出に応用できる可能性がある[12)]．

1.10.3 一般の非可換観測量の間の不確定性関係

一般に，エルミート演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の交換関係が，

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \tag{1.130}$$

で与えられるとき，不確定性関係

$$\Delta A\Delta B \geq \frac{1}{2}|\langle \hat{C} \rangle| \tag{1.131}$$

が成立することが，位置と運動量の不確定性関係の場合と同様に証明できる ((1.104) で $\hat{A}$ の代わりに $\hat{D} = t\Delta\hat{A} - i\Delta\hat{B}$ とおいて計算せよ)．

一般に，状態 Ψ が非可換な (すなわち交換関係が 0 でない) エルミート演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の最小不確定状態 (すなわち (1.131) で等号が成立する状態) となる十分条件は，Ψ が演算子

---

12) 詳しい議論は次の文献を参照されたい．M. Ozawa, Phys. Rev. Lett. **60**, 385 (1988); Phys. Lett. A **299**, 1 (2002); Phys. Rev. A **67**, 042105 (2003).

$$\hat{D} = e^r \hat{A} + ie^{-r} \hat{B} \tag{1.132}$$

(r は実数) の固有状態

$$\hat{D}\Psi = D\Psi, \qquad D = e^r \langle \hat{A} \rangle + ie^{-r} \langle \hat{B} \rangle \tag{1.133}$$

となっていることである．実際，$\Delta\hat{A} \equiv \hat{A} - \langle \hat{A} \rangle$, $\Delta\hat{B} \equiv \hat{B} - \langle \hat{B} \rangle$ とおくと，(1.133) から $(\hat{D} - D)\Psi = 0$，すなわち，

$$(e^r \Delta\hat{A} + ie^{-r} \Delta\hat{B})\Psi = 0$$

が得られる．この状態のノルム[13]の 2 乗をとると，

$$\begin{aligned} \| (e^r \Delta\hat{A} + ie^{-r} \Delta\hat{B})\Psi \|^2 &= \langle (e^r \Delta\hat{A} - ie^{-r} \Delta\hat{B})(e^r \Delta\hat{A} + ie^{-r} \Delta\hat{B}) \rangle \\ &= \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle e^{2r} + \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle e^{-2r} + i \langle [\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] \rangle \\ &= \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle e^{2r} + \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle e^{-2r} - \langle \hat{C} \rangle = 0. \end{aligned}$$

ここで，$\langle \cdots \rangle$ は，状態 Ψ に対する期待値 $\int \Psi^* \cdots \Psi \, dx$ を表している．また，最後の等式を導く際に交換関係 (1.130) を使った．相加平均が相乗平均よりも大きいことを使うと，

$$\begin{aligned} \langle \hat{C} \rangle &= \langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle e^{2r} + \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle e^{-2r} \\ &\geq 2\sqrt{\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle}. \end{aligned} \tag{1.134}$$

これが不等式 (1.131) と両立するためには，等号が成立しなければならない．したがって，状態 $|\Psi\rangle$ は最小不確定状態である．(1.134) で等号が成立するのは，$\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle e^{2r} = \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle e^{-2r} = \langle \hat{C} \rangle / 2$ の場合である．よって，最小不確定状態におけるオブザーバブル $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の分散は，

$$\langle (\Delta\hat{A})^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{C} \rangle e^{-2r}, \qquad \langle (\Delta\hat{B})^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{C} \rangle e^{2r} \tag{1.135}$$

で与えられることがわかる．これから，$|\Psi\rangle$ は $r \to \infty$ で $\hat{A}$ の固有状態となり，また，$r \to -\infty$ で $\hat{B}$ の固有状態となることがわかる．$r \neq 0$ の場合は，$\hat{A}$ と $\hat{B}$ の一方の揺らぎが他方の揺らぎよりも小さくなっている．

---

13) 状態 Ψ のノルム $\|\Psi\|$ は $\sqrt{\int \Psi^* \Psi \, dx}$ である．$\hat{O}$ を任意の演算子とすると，$\hat{O}\Psi$ のノルムは $\| \hat{O}\Psi \| \equiv \sqrt{\int \Psi^* \hat{O}^\dagger \hat{O} \Psi \, dx}$ と定義される．

問題 1.7 ハミルトニアンが,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}\hat{x}^2$$

で与えられる調和振動子において，位置と運動量の期待値が,

$$\langle \hat{x} \rangle = x_0, \qquad \langle \hat{p} \rangle = p_0 \tag{1.136}$$

で与えられる 1 に規格化された最小不確定状態が,

$$\Psi(x) = \left(\frac{m\omega e^{2r}}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega e^{2r}}{2\hbar}(x-x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0 x} \tag{1.137}$$

で与えられることを示せ．また，この状態に対して位置と運動量の分散が,

$$\langle (\Delta\hat{x})^2 \rangle = \frac{1}{2}e^{-2r}, \qquad \langle (\Delta\hat{p})^2 \rangle = \frac{1}{2}e^{2r} \tag{1.138}$$

で与えられることを確かめよ．

【解答】 (1.132) の演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ として，それぞれ無次元化された位置と運動量演算子

$$\hat{A} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x}, \qquad \hat{B} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\,\hat{p}$$

を当てはめると，最小不確定状態は，次の演算子の固有状態である．

$$\hat{D} = e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} + ie^{-r}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\,\hat{p} = e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\hat{x} + e^{-r}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d}{dx}.$$

固有値方程式は $\hat{D}\Psi = D\Psi$ であり，これから

$$e^{-r}\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\frac{d\Psi}{dx} = \left(D - e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x\right)\Psi.$$

ここで D は,

$$\begin{aligned} D &= e^r\langle \hat{A} \rangle + ie^{-r}\langle \hat{B} \rangle \\ &= e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x_0 + ie^{-r}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\,p_0 \end{aligned}$$

で与えられる．これを積分すると,

$$\Psi(x) = \Psi(0)\exp\left[e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left(Dx - \frac{e^r}{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x^2\right)\right]. \tag{1.139}$$

波動関数は 1 に規格化されているので,

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2\,dx \\ &\quad = |\Psi(0)|^2\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left((D+D^*)x - e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x^2\right)\right]dx \end{aligned}$$

$$= |\Psi(0)|^2 e^{e^{2r}\frac{m\omega}{\hbar}x_0^2}\sqrt{\frac{\pi\hbar}{e^{2r}m\omega}} = 1.$$

これから求められる $\Psi(0)$ を (1.139) に代入すると,

$$\Psi(x) = \left(\frac{e^{2r}m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left\{e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\left[\left(e^r\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x_0 + ie^{-r}\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}}\,p_0\right)x - \frac{e^r}{2}\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x^2\right] - \frac{e^{2r}}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x_0^2\right\}$$

$$= \left(\frac{e^{2r}m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{e^{2r}}{2}\frac{m\omega}{\hbar}(x-x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0 x} \tag{1.140}$$

が得られる. ∎

問題 1.8 任意の演算子 $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ に関して, 次の恒等式が成立することを証明せよ.

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}], \tag{1.141}$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B}. \tag{1.142}$$

【解答】

$$\begin{aligned} \hat{A}, \hat{B}\hat{C}t &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \\ &= (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}) \\ &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]. \end{aligned}$$

(1.142) も同様に証明できる. ∎

問題 1.9 角運動量演算子 $\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ は, 位置演算子と運動量演算子を用いて次のように定義される.

$$\hat{L}_x \equiv \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \qquad \hat{L}_y \equiv \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \qquad \hat{L}_z \equiv \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x. \tag{1.143}$$

角運動量演算子が, 次の交換関係を満足することを示せ.

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y. \tag{1.144}$$

これらの交換関係を (1.130) に当てはめると, 角運動量の間に成り立つ不確定性関係 $\Delta L_x \Delta L_y \geq \hbar|\langle L_z\rangle|/2$ などが得られる.

【解答】 恒等式 (1.141), (1.142) を用いると,

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\hat{L}_z.$$

他の交換関係も同様に証明できる. ∎

1.10.4 時間とエネルギーの不確定性関係

(1.7) から交換関係 $[\hat{E}, t] = i\hbar$ が成立するので，これから不等式

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2} \tag{1.145}$$

が導かれるように思われる．実は，不等式 (1.145) は成立するのだが，その導出と解釈は位置と運動量の不確定性関係とは全く異なる．その理由は，古典力学と同様に，量子力学においても時間は状態の変化を記述するためのパラメーターに過ぎず，任意の精度で指定できることが前提とされているからである．実際，波動関数 $\Psi(x,t)$ は各時刻ごとに与えられるので，時刻の揺らぎ

$$\Delta t = \sqrt{\langle t^2 \rangle - \langle t \rangle^2}$$

は存在しない．(1.100) が位置と運動量が同時に確定した値をとりえないことを主張しているのに対して，(1.145) は，系のエネルギーは各時刻では正確に測定できるが，時間が Δt だけ離れた 2 回の測定によって，正確に測定されたエネルギー E と E' の差が $\hbar/(2\Delta t)$ 程度違うことを主張している．したがって，エネルギーの保存は Δt だけ時間的に離れた 2 回の測定によって，$\hbar/(2\Delta t)$ 程度の精度でしか確かめることができない．これがエネルギーと時間の不確定性関係の物理的意味である．

(1.145) を導くために系とそのエネルギーを測定する測定器を考え，それらを記述するハミルトニアンをそれぞれ $\hat{H}^{系}$, $\hat{H}^{測定器}$ と書こう．時刻 $t = 0$ 以前では両者は相互作用しておらず，時刻 $t = 0$ に系のエネルギーを測定するために相互作用 $\hat{V}$ をスイッチオンし，時刻 $t = t_0 (> 0)$ において相互作用を終えるとしよう．この間，全系のハミルトニアンは，

$$\hat{H} = \hat{H}^{系} + \hat{H}^{測定器} + \hat{V} \equiv \hat{H}_0 + \hat{V} \tag{1.146}$$

で与えられる．全系の状態は，シュレーディンガー方程式

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = (\hat{H}_0 + \hat{V}) \Psi(x,t) \tag{1.147}$$

に従って時間発展する．ここで，相互作用表示に移って，

$$\Psi(x,t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \Psi_{\mathrm{I}}(x,t) \tag{1.148}$$

とおくと，(1.147) は次のように変換される．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{\rm I}(x,t)=\hat{V}_{\rm I}(t)\Psi_{\rm I}(x,t), \qquad \hat{V}_{\rm I}(t)\equiv e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}. \tag{1.149}$$

系に対する測定の反作用をできるだけ抑えるために，相互作用 $\hat{V}$ は小さいものと仮定して (1.149) を最低次の近似で解くと，

$$\Psi_{\rm I}(x,t)\simeq\left(1-\frac{i}{\hbar}\int_0^{t_0}V_{\rm I}(t)\,dt\right)\Psi_{\rm I}(x,0). \tag{1.150}$$

ここで，$\Psi_{\rm I}(x,0)=\Psi(x,0)\equiv\Psi_{\rm i}(x)$ に注意すると，全系の波動関数が始状態 $\Psi_{\rm i}$ から終状態 $\Psi_{\rm f}$ へと遷移する確率振幅は，次のように与えられる．

$$\begin{aligned}&\int\Psi_{\rm f}^*(x)\Psi_{\rm I}(x,t)\,dx\\ &\quad\simeq\int\Psi_{\rm f}^*(x)\Psi_{\rm i}(x)\,dx-\frac{i}{\hbar}\int dx\int_0^{t_0}dt\;\Psi_{\rm f}^*\hat{V}_{\rm I}(t)\Psi_{\rm i}.\end{aligned} \tag{1.151}$$

ここで，右辺の第 1 項は，相互作用 (すなわち測定) が関与しない項の寄与であるので無視する．始状態と終状態が，それぞれエネルギー $E_{\rm i}$, $E_{\rm f}$ の $\hat{H}_0$ の固有状態であると仮定すると，

$$\begin{aligned}\int dx\;\Psi_{\rm f}^*\hat{V}_{\rm I}(t)\Psi_{\rm i}&=\int dx\;\Psi_{\rm f}^*e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\hat{V}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}\Psi_{\rm i}\\ &=e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\rm f}-E_{\rm i})t}\int dx\;\Psi_{\rm f}^*\hat{V}\Psi_{\rm i}\\ &\equiv e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\rm f}-E_{\rm i})t}\langle{\rm f}|\hat{V}|{\rm i}\rangle\end{aligned}$$

となる．したがって，相互作用により系が $\Psi_{\rm i}$ から $\Psi_{\rm f}$ へ遷移する確率 $P_{\rm i\to f}$ は，

$$\begin{aligned}P_{\rm i\to f}&\simeq\frac{1}{\hbar^2}\left|\langle{\rm f}|\hat{V}|{\rm i}\rangle\int_0^{t_0}dt\;e^{\frac{i}{\hbar}(E_{\rm f}-E_{\rm i})t}\right|^2\\ &=4|\langle{\rm f}|\hat{V}|{\rm i}\rangle|^2\frac{\sin^2\frac{(E_{\rm f}-E_{\rm i})t_0}{2\hbar}}{(E_{\rm f}-E_{\rm i})^2}.\end{aligned} \tag{1.152}$$

この結果は，始状態と終状態のエネルギーの差 $E_{\rm f}-E_{\rm i}$ が，(1.152) に従って分布していることを意味しており，その差の最も確からしい値は，相互作用が働く時間を t_0 とすると $|E_{\rm f}-E_{\rm i}|\lesssim\hbar/t_0$ で与えられる．$E_{\rm f}(E_{\rm (i)})$ は，始状態 (終状態) における系と測定器を合わせた全系のエネルギーであるから，測定器のエネルギーが正確にわかっても，系のエネルギーは $\hbar/t_0$ 程度の精度でしか知ることはできない．この結果は，系と測定器の間の相互作用 $\hat{V}$ の大きさによらず成立することに注意しよう．特に，相互作用時間が無限大の極限では公式

$$\delta(\alpha) = \lim_{t\to\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\pi\alpha^2 t} \tag{1.153}$$

を使うと，系が状態 i から f へと単位時間あたりに遷移する確率

$$w_{\mathrm{fi}} \equiv \lim_{t_0\to\infty} \frac{P_{\mathrm{i}\to\mathrm{f}}}{t_0} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle \mathrm{f}|\hat{V}|\mathrm{i}\rangle|^2 \delta(E_{\mathrm{f}} - E_{\mathrm{i}}) \tag{1.154}$$

が得られる．(1.154) は**フェルミの黄金律**とよばれる．

1.11 調和振動子

調和振動子は，電磁場や音波などのさまざまな物理現象を理解する際の最も基本的なモデルである．ここでは，調和振動子のエネルギー固有値と固有関数を求める．質量が m，周波数が ω で振動する 1 次元調和振動子のハミルトニアンは，

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \tag{1.155}$$

で与えられる．ここで，位置と運動量演算子は交換関係

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \tag{1.156}$$

を満たすものと仮定する．ハミルトニアン (1.155) のエネルギー固有値を求めるために，次のような一組の演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を導入する．

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} + i\hat{p}), \qquad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}(m\omega\hat{x} - i\hat{p}). \tag{1.157}$$

交換関係 (1.156) は，

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1 \tag{1.158}$$

が成立すれば満たされる．(1.157) を逆に解いた式

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}), \qquad \hat{p} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger - \hat{a}) \tag{1.159}$$

を (1.155) に代入し，交換関係 (1.158) を使って式変形すると，次の結果が得られる．

$$\hat{H} = \hbar\omega\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{2}\right). \tag{1.160}$$

$\hat{a}^\dagger$ は**生成演算子**，$\hat{a}$ は**消滅演算子**とよばれる．その理由は次のとおりである．$\hat{H}$ の固有エネルギー E_n に対する固有状態を $|n\rangle$ と書くと，

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{1.161}$$

両辺の左から $\hat{a}^\dagger$ を掛けると，

$$\begin{aligned}
左辺 &= \hat{a}^\dagger \hat{H}|n\rangle = \hbar\omega \hat{a}^\dagger \Bigl(\overbrace{\hat{a}^\dagger \hat{a}}^{\hat{a}\hat{a}^\dagger - 1} + \frac{1}{2} \Bigr)|n\rangle \\
&= \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a}\ \hat{a}^\dagger - \hat{a}^\dagger + \frac{1}{2}\hat{a}^\dagger \right)|n\rangle \\
&= \hat{H}\hat{a}^\dagger|n\rangle - \hbar\omega\hat{a}^\dagger|n\rangle, \\
右辺 &= E_n \hat{a}^\dagger|n\rangle
\end{aligned}$$

となるので，

$$\hat{H}\hat{a}^\dagger|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)\hat{a}^\dagger|n\rangle \tag{1.162}$$

であることがわかる．したがって，$\hat{a}^\dagger|n\rangle$ はエネルギー固有値が $E_n + \hbar\omega$ で与えられる $\hat{H}$ の固有状態であることがわかる．このように，$\hat{a}^\dagger$ はエネルギー $\hbar\omega$ をもった量子を 1 個生成する役割をしている． 同様の計算を $\hat{a}$ について行うと，

$$\hat{H}\hat{a}|n\rangle = (E_n - \hbar\omega)\hat{a}|n\rangle$$

が得られる．したがって，$\hat{a}$ はエネルギー量子 $\hbar\omega$ を 1 個消滅させる役割を果たしている．系の最低エネルギー状態は**真空状態**とよばれる．それを $|0\rangle$ と書くと，これよりエネルギーの低い状態はないから

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{1.163}$$

でなければならない．したがって，

$$\hat{H}|0\rangle = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right)|0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|0\rangle. \tag{1.164}$$

これから，調和振動子系のとりうる最低エネルギーが 0 ではなく，$E_0 = \hbar\omega/2$ であることがわかる．これを**零点エネルギー**という．最低エネルギーが 0 にならない起源は，(1.160) を導出する過程からわかるように，交換関係，$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ にある．$|0\rangle$ に $\hat{a}^\dagger$ を n 回作用させてできる状態 $|n\rangle$ のエネルギー E_n は，

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \qquad (n = 0, 1, 2, \cdots). \tag{1.165}$$

このように，量子化された調和振動子のエネルギーは，$\hbar\omega$ (エネルギー量子) を基本単位として等間隔に並ぶ．

$$\hat{n} \equiv \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \tag{1.166}$$

を**数演算子**，$|n\rangle$ は **フォック状態**とよばれる．(1.165) から，数演算子は次の固有値方程式を満足していることがわかる．

$$\hat{n}|n\rangle = \hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle. \tag{1.167}$$

消滅演算子 $\hat{a}$ は量子を 1 つ消滅させる演算子だから，$\hat{a}|n\rangle$ は $|n-1\rangle$ に比例する．

$$\hat{a}|n\rangle = c|n-1\rangle. \tag{1.168}$$

ここで，c は比例定数である．$\langle n|\hat{a}^{\dagger} = c^{*}\langle n-1|$ に注意して (1.168) のノルムの 2 乗をとると，

$$\underbrace{\langle n|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|n\rangle}_{n\langle n|n\rangle = n} = |c|^2\langle n-1|n-1\rangle = |c|^2 \longrightarrow c = \sqrt{n}e^{i\varphi} = \sqrt{n}.$$

ここで，フォック状態が 1 に規格化されている ($\langle n|n\rangle = 1$) ことを使った．また，位相 φ は任意にとってよいので 0 とおいた．他方，生成演算子 $\hat{a}^{\dagger}$ は量子数を 1 個増加させる演算子だから，$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle$ は $|n+1\rangle$ に比例する．

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \alpha|n+1\rangle. \tag{1.169}$$

両辺のノルムをとると，

$$\underbrace{\langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|n\rangle}_{\langle n|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}+1|n\rangle = n+1} = |\alpha|^2\langle n+1 \mid n+1\rangle = |\alpha|^2 \longrightarrow \alpha = \sqrt{n+1}$$

よって，次の結果が得られる．

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle, \tag{1.170}$$

$$\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle. \tag{1.171}$$

(1.171) をくり返し適用することにより，次の等式が成立することがわかる．

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^{\dagger})^{n}|0\rangle. \tag{1.172}$$

調和振動子の固有状態であるフォック状態 $|n\rangle$ に対応する波動関数 $\phi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle$ を求めよう．固有値方程式 (1.161) にハミルトニアン (1.155) を代入すると，

$$\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right)|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{1.173}$$

両辺の左から $\langle x|$ を作用させ，

$$\langle x|\hat{p} = \frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\langle x| \tag{1.174}$$

および $\phi_n(x) \equiv \langle x|n\rangle$ を代入すると，波動関数 $\phi_n(x)$ の満足すべきシュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2\hat{x}^2}{2}\right)\phi_n(x) = E_n\phi_n(x) \tag{1.175}$$

が得られる．

$\phi_n(x)$ は次のようにして求めることができる．まず，$\phi_{n=0}(x) = \langle x|n=0\rangle$ は，$\hat{a}|0\rangle = 0$ および $\hat{a} = (m\omega\hat{x} + i\hat{p})/\sqrt{2m\hbar\omega}$ を使うと方程式

$$\langle x|\hat{a}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\left(m\omega x + \hbar\frac{d}{dx}\right)\langle x|0\rangle = 0. \tag{1.176}$$

に従うことがわかる．これから，

$$\phi_0(x) \equiv \langle x|0\rangle = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{1.177}$$

が得られる．ここで，係数は，規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_0^2(x)\,dx = 1$$

を満足するように決められた．フォック状態 $|n\rangle$ に対応する波動関数は，(1.172) と (1.157) より

$$\begin{aligned}\phi_n(x) = \langle x|n\rangle &= \langle x|\frac{(\hat{a}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}(2m\hbar\omega)^{\frac{n}{2}}}\left(m\omega x - \hbar\frac{d}{dx}\right)^n\phi_0(x).\end{aligned} \tag{1.178}$$

ここで，

$$m\omega x - \hbar\frac{d}{dx} = -\hbar e^{\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\frac{d}{dx}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{1.179}$$

であることを使い，$\xi \equiv x\sqrt{m\omega/\hbar}$ とおくと，(1.178) は次のように変形できる．

$$\phi_n(x) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi). \tag{1.180}$$

ここで,

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \tag{1.181}$$

は**エルミート多項式**である．最初のいくつかを書き下すと,

$$H_0(\xi) = 1,\ H_1(\xi) = 2\xi,\ H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2,\ H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi. \tag{1.182}$$

問題 1.10　調和振動子の固有関数 $\phi_n(x)$ が，完全性条件 (1.54) を満足していることを確かめよ．

【解答】　$\phi_n(x)$ は実関数なので，$d \equiv \sqrt{\hbar/m\omega}$ とおくと,

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n(y) = \frac{1}{\sqrt{\pi d^2}} e^{-\frac{x^2+y^2}{d^2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n\left(\frac{x}{d}\right) H_n\left(\frac{y}{d}\right). \tag{1.183}$$

ここで，公式

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{2^n n!} H_n\left(\frac{x}{d}\right) H_n\left(\frac{y}{d}\right)$$
$$= \lim_{z\to 1} \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp\left[\frac{2xyz - (x^2+y^2)z^2}{(1-z^2)d^2}\right] \tag{1.184}$$

を使うと[14),

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n(y)$$
$$= \frac{1}{\sqrt{\pi d^2}} \lim_{z\to 1} \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp\left[-\frac{x^2+y^2}{2d^2}\frac{1+z^2}{1-z^2} + \frac{2xyz}{(1-z^2)d^2}\right]. \tag{1.185}$$

さらに，$z = 1 - \epsilon$ とおくと右辺は,

$$\lim_{\epsilon\to 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi d^2\epsilon}} e^{-\frac{(x-y)^2}{2d^2\epsilon}} = \delta(x-y) \tag{1.186}$$

となる．ここで，付録の公式 (A.5) を使った．こうして調和振動子の固有関数系が完全性条件

$$\sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n(y) = \delta(x-y) \tag{1.187}$$

を満足していることがわかる．　■

14)　より一般的に，次の公式が成立する．

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{2^n n!} H_n(x) H_n(y) = \frac{1}{\sqrt{1-z^2}} \exp\left[\frac{2xyz - (x^2+y^2)z^2}{1-z^2}\right].$$

生成消滅演算子はハイゼンベルク表示では，(1.79) より

$$\hat{a}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}, \tag{1.188}$$

$$\hat{a}^\dagger(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{a}^\dagger e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{1.189}$$

で与えられる．ここでは，調和振動子のハミルトニアン (1.160) の場合について，$\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)$ を具体的に計算してみよう．ハイゼンベルクの運動方程式 (1.83) より

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t) = -i\omega\hat{a}(t), \qquad \frac{d}{dt}\hat{a}^\dagger(t) = i\omega\hat{a}^\dagger(t). \tag{1.190}$$

これらを解くと，

$$\hat{a}(t) = \hat{a}e^{-i\omega t}, \qquad \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger e^{i\omega t} \tag{1.191}$$

が得られる．これらを (1.159) に代入すると，ハイゼンベルク表示における位置演算子と運動量演算子の時間依存性が，

$$\begin{aligned} \hat{x}(t) &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} + \hat{a}e^{-i\omega t}), \\ \hat{p}(t) &= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(\hat{a}^\dagger e^{i\omega t} - \hat{a}e^{-i\omega t}) \end{aligned} \tag{1.192}$$

で与えられることがわかる．

1.12 トンネル効果と量子反射

トンネル効果と量子反射は，量子論に特有かつ普遍的な効果であり，古典的には不可能なさまざまな現象を引き起こす．ここでは具体例として，高さが V_0，幅が $2a$ のポテンシャル障壁を考え，その左側からエネルギーが，

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \tag{1.193}$$

の粒子が入射する状況を考えよう (図 1.3).

古典論では，粒子のエネルギー E が，条件 $E > V_0$ を満たす場合は確率 1 でポテンシャルを通過し，$E < V_0$ の場合は確率 1 で反射される．しかし，量子論では $E > V_0$ でも粒子は 0 でない確率で反射され，$E < V_0$ の場合でも 0 でない確率で粒子はポテンシャル障壁を透過する．これは，粒子が波の性質をもつことからくる量子力学的効果であり，前者を**量子反射**，後者を**トンネル効果**という．

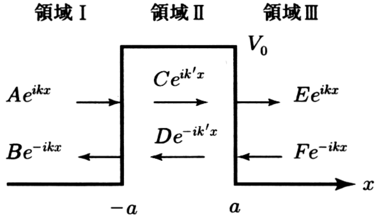


図 1.3 幅が $2a$，エネルギーの高さが V_0 のポテンシャル障壁の概念図．矢印は波が進行する方向を指している．

シュレーディンガー方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V(x)\right]\Psi(x)=E\Psi(x), \quad E=\frac{\hbar^2k^2}{2m} \tag{1.194}$$

において，領域 I $(x\leq -a)$ では $V(x)=0$ なので，波動関数は一般に，

$$\Psi_{\mathrm{I}}(x)=Ae^{ikx}+Be^{-ikx}, \qquad k=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2mE} \tag{1.195}$$

と書ける．領域 III $(x\geq a)$ も同様で，波動関数は一般に，

$$\Psi_{\mathrm{III}}(x)=Ee^{ikx}+Fe^{-ikx} \tag{1.196}$$

と書ける．領域 II $(-a\leq x\leq a)$ では $V(x)=V_0$ なので，波動関数は，

$$\Psi_{\mathrm{II}}(x)=Ce^{ik'x}+De^{-ik'x}, \qquad k'=\frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E-V_0)} \tag{1.197}$$

と書ける．波動関数の係数の関係は，$x=\pm a$ で波動関数とその微分が連続でなければならない (問題 1.1 参照) という条件から決まる．すなわち，

$$\Psi_{\mathrm{I}}(-a)=\Psi_{\mathrm{II}}(-a)\longrightarrow Ae^{-ika}+Be^{ika}=Ce^{-ik'a}+De^{ik'a}, \tag{1.198}$$

$$\Psi'_{\mathrm{I}}(-a)=\Psi'_{\mathrm{II}}(-a)\longrightarrow k[Ae^{-ika}-Be^{ika}]=k'[Ce^{-ik'a}-De^{ik'a}], \tag{1.199}$$

$$\Psi_{\mathrm{II}}(a)=\Psi_{\mathrm{III}}(a)\longrightarrow Ce^{ik'a}+De^{-ik'a}=Ee^{ika}+Fe^{-ika}, \tag{1.200}$$

$$\Psi'_{\mathrm{II}}(a)=\Psi'_{\mathrm{III}}(a)\longrightarrow k'[Ce^{ik'a}-De^{-ik'a}]=k[Ee^{ika}-Fe^{-ika}]. \tag{1.201}$$

(1.198) と (1.199) を行列形式にまとめると，

$$\begin{pmatrix} e^{-ika} & e^{ika} \\ ke^{-ika} & -ke^{ika} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} e^{-ik'a} & e^{ik'a} \\ k'e^{-ik'a} & -k'e^{ik'a} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}.$$

これから，

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{2k} \begin{pmatrix} (k+k')e^{i(k-k')a} & (k-k')e^{i(k+k')a} \\ (k-k')e^{-i(k+k')a} & (k+k')e^{-i(k-k')a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix}. \tag{1.202}$$

(C, D) と (E, F) の関係式は (1.202) で a の符号を変え，k と k' を入れ替えることによって得られる．

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \frac{1}{2k'} \begin{bmatrix} (k+k')e^{i(k-k')a} & -(k-k')e^{-i(k+k')a} \\ -(k-k')e^{i(k+k')a} & (k+k')e^{-i(k-k')a} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}. \tag{1.203}$$

(1.202) を (1.203) に代入すると，

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} &= \frac{(k+k')^2}{4kk'} \begin{bmatrix} \alpha e^{2i(k-k')a} & 2i\frac{k-k'}{k+k'}\sin 2k'a \\ -2i\frac{k-k'}{k+k'}\sin 2k'a & \beta e^{-2i(k-k')a} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

ただし，$\alpha = 1 - \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 e^{4ik'a}$, $\beta = 1 - \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 e^{-4ik'a}$ である．右辺の行列を転送行列という．左から平面波が入射し，右からの入射波がない場合は，$F = 0$ なので，

$$A = M_{11}E, \qquad B = M_{21}E. \tag{1.204}$$

これから，透過確率 T と反射確率 R が，

$$T = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{1}{|M_{11}|^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2-k'^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2(2k'a)}, \tag{1.205}$$

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{|M_{21}|^2}{|M_{11}|^2} = \frac{\left(\frac{k^2-k'^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2(2k'a)}{1 + \left(\frac{k^2-k'^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2(2k'a)} = 1 - T \tag{1.206}$$

で与えられることがわかる．以上の議論は，$E > V_0$ と $E < V_0$ の両方の場合に対して当てはまる．

まず，$E > V_0$ の場合を考えよう．古典論では，粒子は確率 1 で透過し反射確率は 0 となるが，量子論では (1.206) からわかるように，一般には 0 とはならず，粒子は 0 でない確率で量子反射する．ただし，(1.206) の分子が 0 となる場合は例外で，波数 k' が，

$$k' = \frac{\pi n}{2a} = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(E - V_0)} \longrightarrow E = V_0 + \frac{\pi^2\hbar^2 n^2}{8ma^2} \tag{1.207}$$

を満足する場合 ($n = 1, 2, 3, \cdots$) は，入射波は**共鳴**を起こして確率 1 でポテンシャル障壁を透過する．

次に，$E < V_0$ の場合を考えよう．この場合，波数 k' は純虚数となるので，

$$\kappa \equiv -ik' = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)} \tag{1.208}$$

という量を導入すると，(1.205), (1.206) はそれぞれ次のようになる．

$$T = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2+\kappa^2}{2k\kappa}\right)^2 \sinh^2(2\kappa a)}, \tag{1.209}$$

$$R = \frac{\left(\frac{k^2+\kappa^2}{2k\kappa}\right)^2 \sinh^2(2\kappa a)}{1 + \left(\frac{k^2+\kappa^2}{2k\kappa}\right)^2 \sinh^2(2\kappa a)} = 1 - T. \tag{1.210}$$

(1.209) から，透過確率は指数関数的に減少するが 0 ではないことがわかる．これをトンネル効果という．特に，$\kappa a \gg 1$ の場合は，(1.209) は次のように簡単化される．

$$T \simeq \left(\frac{4k\kappa}{k^2 + \kappa^2}\right)^2 e^{-4\kappa a}. \tag{1.211}$$

2. 量子力学の基礎 II

2.1 対称性と保存則

エネルギー，運動量，角運動量の**保存則**は，粒子の種類や粒子間の相互作用など系の具体的性質にはよらず，時間や空間の一様性や等方性に関する系がもつ**対称性**から一般的に導かれる法則である．

時間の並進対称性とエネルギー保存

ハミルトニアン $\hat{H}$ が時間に陽に依存しないときは，

$$\frac{d}{dt}\hat{H} = 0 \tag{2.1}$$

であり，ハミルトニアンの期待値として定義されるエネルギーが保存される[1]．実際，シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{2.2}$$

の解は，$\hat{H}$ が時間に陽に依存しない場合は，

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle \tag{2.3}$$

と書くことができる．$\hat{H}$ は自分自身と交換するので，

$$\langle\Psi(t)|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(0)|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\Psi(0)\rangle = \langle\Psi(0)|\hat{H}|\Psi(0)\rangle \tag{2.4}$$

となり，エネルギーは保存される．

---

1) 以下の議論から明らかなように，実際にはハミルトニアンの期待値だけでなく，その揺らぎなどの情報を含む任意のべき $\hat{H}^k$ の期待値も保存される．

(2.3) は系の時間の原点をずらすユニタリー演算子が,

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} \tag{2.5}$$

で与えられることを示している. $\hat{U}(t)$ は**時間発展演算子**, ハミルトニアンはその**生成子**であるといわれる. ハミルトニアンが時間に依存しないことは, 時間の原点をずらしても系の性質が変化しないことを意味する. このとき, 系は**時間の並進対称性**をもつという. **エネルギー保存則**は系がもつ時間の並進対称性の帰結である.

空間の並進対称性と運動量保存

波動関数 $\Psi(x)$ で記述される系全体を x 軸の正の方向へ x_0 だけ平行移動することを考えよう. このとき平行移動された系の波動関数は $\Psi(x-x_0)$ となる. これを x のまわりにテイラー展開すると,

$$\begin{aligned}\Psi(x-x_0) &= \left(1 + (-x_0)\frac{d}{dx} + \frac{(-x_0)^2}{2!}\frac{d^2}{dx^2} + \cdots\right)\Psi(x) \\ &= e^{-x_0\frac{d}{dx}}\Psi(x) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\Psi(x)\end{aligned} \tag{2.6}$$

が得られる. ここで, $\hat{p} = -i\hbar\, d/dx$ は運動量演算子である. これから系全体を平行移動するユニタリー演算子が,

$$\hat{T}(x_0) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0} \tag{2.7}$$

であり, 運動量演算子がその生成子であることがわかる.

平行移動した波動関数 $\Psi(x-x_0)$ を用いて計算したハミルトニアン $\hat{H}$ の期待値が, もとの波動関数 $\Psi(x)$ から得られる期待値と任意の x_0 に対して一致するとき, 系は**空間の並進対称性**をもつという. このとき次の等式が成立する.

$$\int \Psi^*(x)\hat{H}\Psi(x)\,dx = \int \Psi^*(x-x_0)\hat{H}\Psi(x-x_0)\,dx. \tag{2.8}$$

これに (2.6) を代入すると,

$$\begin{aligned}\int \Psi^*(x)\hat{H}\Psi(x)\,dx &= \int (e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\Psi(x))^*\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\Psi(x)\,dx \\ &= \int (\hat{T}(-x_0)\Psi(x))^*\hat{H}\hat{T}(-x_0)\Psi(x)\,dx.\end{aligned}$$

右辺にエルミート共役 $\hat{T}^\dagger$ の定義式 (1.40) を当てはめると,

$$\int \Psi^*(x)\hat{H}\Psi(x)\,dx = \int \Psi(x)^*\hat{T}^\dagger(-x_0)\hat{H}\hat{T}(-x_0)\Psi(x)\,dx$$
$$= \int \Psi^*(x)e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\Psi(x)\,dx \tag{2.9}$$

が得られる．これが任意の波動関数 $\Psi(x)$ に対して成立するためには，

$$\hat{H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{p}x_0} \tag{2.10}$$

でなければならない．x_0 が微小量であると仮定して右辺を展開すると，

$$\hat{H} = \hat{H} + \frac{i}{\hbar}[\hat{p}, \hat{H}]x_0 + O(x_0^2) \tag{2.11}$$

となる．ここで，$O(x_0^2)$ は x_0^2 と同程度かそれ以下の微小量を意味する．(2.11) が任意の微小量 x_0 に対して成立するためには，

$$[\hat{p}, \hat{H}] = 0 \tag{2.12}$$

でなければならない．運動量演算子に対するハイゼンベルクの運動方程式が，

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{p}] \tag{2.13}$$

で与えられることを思い出すと，(2.12) が**運動量の保存則**を表していることがわかる．このように，運動量の保存則は系が空間に関する並進対称性をもつことの帰結である．

空間の並進対称性の特別な例として，イオンが周期的な結晶格子を組んでいる固体中での電子の運動を考えよう．この場合は，結晶全体を格子間隔 a の整数倍平行移動した場合に限り系の状態は不変である．これは系が**離散的な対称性**をもつ場合の例である．この場合，(2.10) は $x_0 = na$ (n は整数) の場合にのみ成り立つ．$\hat{T}(na) = (\hat{T}(a))^n$ なので，

$$[\hat{H}, (\hat{T}(a))^n] = 0 \tag{2.14}$$

が成立する．これは，結晶中の電子の固有状態として，$\hat{H}$ と $(\hat{T}(a))^n$ の同時固有状態がとれることを意味している．$\hat{T}(a)$ はユニタリー演算子なので，$(\hat{T}(a))^n$ の固有値は一般に $e^{in\theta}$ と書ける (問題 1.4 参照)．ここで，便宜上 $\theta = ka$ とおいて同時固有関数を $\Psi_{k,E}(x)$ と書くと，

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}na}\Psi_{k,E}(x) = e^{ikan}\Psi_{k,E}(x), \tag{2.15}$$
$$\hat{H}\Psi_{k,E}(x) = E\Psi_{k,E}(x) \tag{2.16}$$

となる．他方，(2.6) より

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{p}na}\Psi_{k,E}(x) = \Psi_{k,E}(x+na)$$

なので，(2.15) は，

$$\Psi_{k,E}(x+na) = e^{ikna}\Psi_{k,E}(x) \tag{2.17}$$

と書ける．(2.17) を満足する固有関数が，平面波 e^{ikx} と周期が a の周期関数 $u_{k,E}(x)$ の積で書けることは容易に確かめることができる．

$$\Psi_{k,E}(x) = e^{ikx}u_{k,E}(x), \qquad u_{k,E}(x+a) = u_{k,E}(x). \tag{2.18}$$

周期ポテンシャル中の粒子の波動関数が (2.18) の形に書けることを，**ブロッホの定理**，$\Psi_{k,E}(x)$ を**ブロッホ関数**という．

空間の等方性と軌道角運動量保存

系を空間的に回転させてもハミルトニアンの期待値が変化しないとき，系は**空間回転対称性**をもつ，あるいは，単に**等方的**であるという．

系を z 軸のまわりに角度 θ 回転させる前と後の波動関数を，それぞれ $\Psi(x,y,z)$, $\Psi'(x,y,z)$ と書くと，両者は次の関係式で結ばれている．

$$\Psi'(x,y,z) = \Psi(x\cos\theta + y\sin\theta,\, y\cos\theta - x\sin\theta,\, z). \tag{2.19}$$

$|\theta| \ll 1$ を仮定して，右辺を θ の 1 次まで展開すると

$$\begin{aligned}\Psi'(x,y,z) &= \Psi(x+y\theta,\, y-x\theta,\, z) + O(\theta^2)\\ &= \left[1+\theta\left(y\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial y}\right)\right]\Psi(x,y,z) + O(\theta^2)\\ &= \left[1-\frac{i}{\hbar}\theta\left(x\hat{p}_y - y\hat{p}_x\right)\right]\Psi(x,y,z) + O(\theta^2)\\ &= \left(1-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z\right)\Psi(x,y,z) + O(\theta^2)\end{aligned} \tag{2.20}$$

が得られる．これから，z 軸のまわりの回転の生成子が，**軌道角運動量**の z 成分

$$\hat{L}_z \equiv x\hat{p}_y - y\hat{p}_x \tag{2.21}$$

であることがわかる．

θ が大きい場合は θ を N 等分して微小回転を N 回行い，$N \to \infty$ なる極限をとると，

$$\Psi'(x,y,z) = \lim_{N\to\infty}\left(1 - \frac{i}{\hbar}\frac{\theta}{N}\hat{L}_z\right)^N \Psi(x,y,z)$$
$$= e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{L}_z}\Psi(x,y,z) \tag{2.22}$$

が得られる．これから系を z 軸のまわりに角度 θ だけ回転させる演算子が，

$$\hat{R}_z(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\theta} \tag{2.23}$$

で与えられることがわかる[2)]．$\hat{L}_z$ は z 軸のまわりの回転の生成子とよばれる．同様にして，x, y 軸のまわりの回転の生成子は，それぞれ軌道角運動量の x, y 成分

$$\hat{L}_x \equiv y\hat{p}_z - z\hat{p}_y, \qquad \hat{L}_y \equiv z\hat{p}_x - x\hat{p}_z \tag{2.24}$$

で与えられ，それぞれの軸のまわりに角度 θ 回転させる演算子が，

$$\hat{R}_x(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_x\theta}, \qquad \hat{R}_y(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_y\theta} \tag{2.25}$$

であることがわかる．

運動量の場合と同様に，$\Psi(x,y,z)$ と $\Psi'(x,y,z)$ で計算したハミルトニアンの期待値が同じであるためには，

$$\hat{H} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\theta}\hat{H}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\theta} \tag{2.26}$$

でなければならない．θ が微小量であると思って右辺を展開すると，

$$\hat{H} = \hat{H} + \frac{i}{\hbar}[\hat{L}_z, \hat{H}]\theta + O(\theta^2) \tag{2.27}$$

となる．これが任意の微小角 θ に対して成立するためには，

$$[\hat{L}_z, \hat{H}] = 0 \tag{2.28}$$

でなければならない．$\hat{L}_z$ に対するハイゼンベルクの運動方程式

$$\frac{d\hat{L}_z}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{L}_z] \tag{2.29}$$

から，(2.28) が軌道角運動量の z 成分が保存則を表していることがわかる．他の成分についても同様である．このように，軌道角運動量の保存則は系が空間の回転対称性をもつことの帰結である．

---

2)　系を回転させるのではなく座標系を回転させる場合の回転の演算子は，$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{L}_z\theta}$ となる．

非可換な保存量とエネルギーの縮退

以上の議論から明らかなように，系を記述するハミルトニアンと交換するオブザーバブルに対応する物理量は保存される．もし，ハミルトニアンと交換するオブザーバブルが 2 つ存在して，それらが互いに交換しない場合は，系のエネルギーは縮退する．これは次のようにして証明される．ハミルトニアンを $\hat{H}$，これと交換する 2 つの保存量を $\hat{P}, \hat{Q}$ としよう．

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0, \tag{2.30}$$

$$[\hat{H}, \hat{Q}] = 0. \tag{2.31}$$

仮定により $\hat{P}$ と $\hat{Q}$ は互いに交換しないので，

$$[\hat{P}, \hat{Q}] \neq 0 \tag{2.32}$$

である．(2.30) より $\hat{H}$ と $\hat{P}$ の同時固有状態 $|E_1, p_1\rangle$ が存在し，

$$\hat{H}|E_1, p_1\rangle = E_1|E_1, p_1\rangle, \qquad \hat{P}|E_1, p_1\rangle = p_1|E_1, p_1\rangle$$

である．他方，(2.32) から

$$\hat{Q}|E_1, p_1\rangle \neq c|E_1, p_1\rangle \tag{2.33}$$

である（c は 0 でない定数）．その理由は，もし $\hat{Q}|E_1, p_1\rangle = c|E_1, p_1\rangle$ ならば，

$$\hat{P}\hat{Q}|E_1, p_1\rangle = c\hat{P}|E_1, p_1\rangle = cp_1|E_1, p_1\rangle,$$
$$\hat{Q}\hat{P}|E_1, p_1\rangle = p_1\hat{Q}|E_1, p_1\rangle = cp_1|E_1, p_1\rangle$$

となり，$\hat{P}$ と $\hat{Q}$ が交換してしまうからである．ところが，(2.31) より

$$\hat{H}\hat{Q}|E_1, p_1\rangle = \hat{Q}\hat{H}|E_1, p_1\rangle = E_1\hat{Q}|E_1, p_1\rangle$$

なので，$|E_1, p_1\rangle$ と $\hat{Q}|E_1, p_1\rangle$ は同じ固有値 E_1 をもつ $\hat{H}$ の固有状態であり，かつ (2.33) よりこれらは互いに異なっている．したがって，この系のエネルギーは縮退している．

2.2 角運動量

角運動量は量子力学において特別な位置を占める．**軌道角運動量**の量子化は，波動関数の一価性という量子力学の基本的な要請から導かれる．静止している

粒子が，スピンとよばれる角運動量をもつという，古典論にはみられない量子論に特有の性質が現れる．さらに，**スピン角運動量**は，粒子が 2 個以上存在する場合の**量子統計** (第 6 章参照) 決定する．量子力学的な 1 ビットは，スピンが 1/2 の系と等価なので，角運動量は量子情報においても重要な役割を果たす．本節では，角運動量の基本的な性質について述べる．

2.2.1 軌道角運動量

古典力学の場合とは異なり，量子力学では角運動量の固有値は離散的な値をとる．これをみるために，まず (2.21), (2.24) で定義される $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ が互いに交換せず，交換関係

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y \tag{2.34}$$

を満足することに注意する (問題 1.8 参照)．角運動量演算子が互いに交換しないことは，角運動量の各成分が同時固有状態をもたないことを意味する．これは古典力学と大きく異なる点である．古典力学では，角運動量ベクトル $\boldsymbol{L} = (L_x, L_y, L_z)$ の x, y, z 成分は同時に決まった値をとることができ，角運動量は各瞬間ごとにある決まった方向を向くことができる．これに対して，量子力学において角運動量演算子の各成分が同時固有状態をとれないことは，角運動量ベクトルが確実にある方向を向くことができないことを意味している．これをみるために，角運動量ベクトルの期待値が，z 軸の方向を向いている場合 $\langle\hat{\boldsymbol{L}}\rangle = (0, 0, \langle\hat{L}_z\rangle)$ を考えよう．(2.34) の最初の交換関係に対して，不確定性関係 (2.131) を適用すると，

$$\Delta L_x \Delta L_y \geq \frac{1}{2}|\langle\hat{L}_z\rangle| \tag{2.35}$$

が得られる．これは $\langle\hat{L}_z\rangle \neq 0$ の場合は，角運動量が x, y 方向に揺らいでいることを示している．

角運動量の各成分の 2 乗の和で定義される演算子

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 \equiv \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 \tag{2.36}$$

は各成分と交換する．

$$[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_y] = 0, \qquad [\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_z] = 0. \tag{2.37}$$

実際，(1.142) を用いると，最初の式は次のように示すことができる．

$$
\begin{aligned}
[\hat{\boldsymbol{L}}^2, \hat{L}_x] &= [\hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \hat{L}_x] \\
&= \hat{L}_y[\hat{L}_y, \hat{L}_x] + [\hat{L}_y, \hat{L}_x]\hat{L}_y + \hat{L}_z[\hat{L}_z, \hat{L}_x] + [\hat{L}_z, \hat{L}_x]\hat{L}_z \\
&= i\hbar(-\hat{L}_y\hat{L}_z - \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_y + \hat{L}_y\hat{L}_z) = 0.
\end{aligned}
$$

残りの式も同様に証明できる．したがって，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ は，$\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z$ のいずれか 1 つと同時固有状態をもつことができる．以下では，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態を考える．これを $|L, M\rangle$ と書くと，固有方程式は，

$$
\hat{\boldsymbol{L}}^2|L, M\rangle = \hbar^2 f(L)|L, M\rangle, \qquad \hat{L}_z|L, M\rangle = \hbar M|L, M\rangle \tag{2.38}
$$

と書ける．

(2.38) に現れる固有値 M, $f(L)$ を求めるために，角運動量の**昇演算子** $\hat{L}_+$ と**降演算子** $\hat{L}_-$ を次のように定義する．

$$
\hat{L}_+ \equiv \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \qquad \hat{L}_- \equiv \hat{L}_x - i\hat{L}_y \tag{2.39}
$$

(2.37) からこれらが交換関係

$$
[\hat{L}_z, \hat{L}_+] = \hbar\hat{L}_+, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_-] = -\hbar\hat{L}_- \tag{2.40}
$$

を満足することがわかる．これから，

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_z(\hat{L}_+|L, M\rangle) &= \hat{L}_+(\hat{L}_z + \hbar)|L, M\rangle \\
&= \hbar(M+1)\hat{L}_+|L, M\rangle
\end{aligned} \tag{2.41}
$$

が得られ，$\hat{L}_+$ が固有値 M を 1 増加させることがわかる．同様にして，$\hat{L}_-$ が固有値 M を 1 減少させることがわかる．ところで，

$$
\begin{aligned}
\hbar^2(f(L) - M^2) &= \langle L, M|\hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2|L, M\rangle \\
&= \langle L, M|\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2|L, M\rangle \geq 0
\end{aligned} \tag{2.42}
$$

なので，L が与えられたとき M には上限値 $M^{\max}$ と下限値 $M^{\min}$ が存在しなければならない．$|L, M^{\max}\rangle = 0$ の状態に $\hat{L}_+$ を作用させても M の値は増加できないので，

$$
\hat{L}_+|L, M^{\max}\rangle = 0 \tag{2.43}
$$

でなければならない．同様に，

$$
\hat{L}_-|L, M^{\min}\rangle = 0 \tag{2.44}
$$

である．(2.43) の左から $\hat{L}_-$ を作用させて，$\hat{L}_-\hat{L}_+ = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$ を使うと，

$$f(L) = M^{\max}(M^{\max} + 1) \tag{2.45}$$

が得られる．同様に，(2.44) の左から，$\hat{L}_+$ を作用させて，$\hat{L}_+\hat{L}_- = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar\hat{L}_z$ を使うと，

$$f(L) = M^{\min}(M^{\min} - 1) \tag{2.46}$$

が得られる．(2.45) と (2.46) から，$M^{\max} = -M^{\min}$ でなければならないことがわかる．そこで，$M^{\max} = L$ とおくと，

$$f(L) = L(L+1) \tag{2.47}$$

が得られる．したがって，

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hbar^2 L(L+1). \tag{2.48}$$

こうして，$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ と $\hat{L}_z$ の同時固有状態は，

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2|L,M\rangle = \hbar^2 L(L+1)|L,M\rangle, \tag{2.49}$$

$$\hat{L}_z|L,M\rangle = \hbar M|L,M\rangle \tag{2.50}$$

で与えられることがわかる．ここで，$M = L, L-1, \cdots, -L$ である．L と $-L$ の差 $2L$ は整数でなければならないので，L がとりうる値は，

$$0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2,\ \cdots \tag{2.51}$$

である．しかし，座標に依存する軌道角運動量の場合，系を 2π 回転させると波動関数はもとに戻らなければならないという**波動関数の一価性**の条件から，L のとりうる値が整数でなければならない．これを理解するために，$\hat{L}_z$ の固有値が L に等しい状態 $|L,L\rangle$ を考えよう．この系を z 軸のまわりに 2π 回転させる前と後の波動関数 Ψ と Ψ' は，(2.22) より

$$\Psi'(x,y,z) = e^{-2\pi iL}\Psi(x,y,z) \tag{2.52}$$

なる関係で結ばれている．ところが，波動関数の一価性の条件より $\Psi'(x,y,z) = \Psi(x,y,z)$ でなければならないので，$e^{-2\pi iL} = 1$，したがって，L は整数であると結論される．

$$L = 0, 1, 2, \cdots. \tag{2.53}$$

(2.50) から，$\hat{L}_z$ の固有値が，$M = L$ の状態は角運動量の期待値が z 軸の正の方向を向いており，$M = -L$ の状態は負の方向を向いていると考えられる．両者の間の状態が $2L - 1$ 個の離散的な値しかとれないことから，角運動量の方向がとびとびの値しかとれないことがわかる．(2.50) のように，角運動量の固有状態として $\hat{L}_z$ の固有状態をとる場合，角運動量の**量子化軸**を z 軸にとるという．また，量子数 L, M は，それぞれ**方位量子数**，**磁気量子数**ともよばれる．$\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値が $\hbar^2 L^2$ ではなく，$\hbar^2 L(L+1)$ であることは，角運動量が決まった方向をとることができず，平均的な方向に垂直な成分が，分散 $\hbar^2 L$ 程度の量子揺らぎをもっていることを示している．

空間が等方的な系では角運動量は保存されるので，行列要素は L の値が同じ状態間の遷移に対して考えるだけで十分である．$\hat{L}_- \hat{L}_+ = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 - \hbar \hat{L}_z$ を使うと，

$$\begin{aligned} \langle L, M | \hat{L}_- \hat{L}_+ | L, M \rangle &= |\langle L, M+1 | \hat{L}_+ | L, M \rangle|^2 \\ &= \hbar^2 (L - M)(L + M + 1) \end{aligned} \tag{2.54}$$

が得られる．行列要素は一般性を失うことなく実数にとることができるので，

$$\langle L, M+1 | \hat{L}_+ | L, M \rangle = \hbar \sqrt{(L-M)(L+M+1)} \tag{2.55}$$

が得られる．同様にして，$\hat{L}_+ \hat{L}_- = \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{L}_z^2 + \hbar \hat{L}_z$ を用いると

$$\begin{aligned} \langle L, M | \hat{L}_+ \hat{L}_- | L, M \rangle &= |\langle L, M-1 | \hat{L}_- | L, M \rangle|^2 \\ &= \hbar^2 (L + M)(L - M + 1) \end{aligned} \tag{2.56}$$

が得られる．したがって，

$$\langle L, M-1 | \hat{L}_- | L, M \rangle = \hbar \sqrt{(L+M)(L-M+1)} \tag{2.57}$$

が得られる．$\hat{L}_z$ の行列要素は，(2.50) から

$$\langle L, M | \hat{L}_z | L, M' \rangle = \hbar M \delta_{M,M'} \tag{2.58}$$

で与えられる．

固有状態 $|L, M\rangle$ の正規直交条件は，

$$\langle L, M | L', M' \rangle = \delta_{L,L'} \delta_{M,M'} \tag{2.59}$$

である．(2.59) に角度方向の完全性条件

$$\int d\Omega\,|\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi| = \hat{I}, \quad d\Omega = \sin\theta\,d\theta d\phi$$
$$(0 \le \theta \le \pi,\ 0 \le \phi \le 2\pi) \tag{2.60}$$

を挿入する．ここで，θ, ϕ は，**極座標**

$$x = r\sin\theta\cos\phi, \qquad y = r\sin\theta\sin\phi, \qquad z = r\cos\theta \tag{2.61}$$

の天頂角と方位角であり，$d\Omega$ は立体角要素である．すると，

$$\int d\Omega\,\langle L, M|\theta,\phi\rangle\langle\theta,\phi|L', M'\rangle = \int d\Omega\,Y_L^{M*}(\theta,\phi)Y_{L'}^{M'}(\theta,\phi)$$
$$= \delta_{L,L'}\delta_{M,M'} \tag{2.62}$$

が得られる．ここで，$Y_L^M(\theta,\phi) \equiv \langle\theta,\phi|L, M\rangle$ は**球面調和関数**とよばれ，その具体形は以下で求められる．

球面調和関数は，その定義式 $Y_L^M(\theta,\phi) \equiv \langle\theta,\phi|L, M\rangle$ から明らかなように，固有方程式

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 Y_L^M(\theta,\phi) = \hbar^2 L(L+1) Y_L^M(\theta,\phi), \tag{2.63}$$

$$\hat{L}_z Y_L^M(\theta,\phi) = \hbar M Y_L^M(\theta,\phi) \tag{2.64}$$

の同時固有関数である．ここで，$M = L, L-1, \cdots, -L$ である．$Y_L^M(\theta,\phi)$ を求めるために，角運動量演算子を極座標 (2.61) を使って書く．座標 x, y, z に関する偏微分を極座標表示すると，

$$\left.\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial x} &= \sin\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\cos\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{\sin\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}, \\
\frac{\partial}{\partial y} &= \sin\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\theta\sin\phi}{r}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\cos\phi}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}, \\
\frac{\partial}{\partial z} &= \cos\theta\frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\theta}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}
\end{aligned}\right\} \tag{2.65}$$

となるので，

$$\hat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{2.66}$$

が得られる．これを (2.64) へ代入すると，

$$Y_L^M(\theta,\phi) \propto e^{iM\phi}$$

であることがわかる．M が整数値をとることから，系を z 軸のまわりを一周

する (すなわち $\phi \to \phi + 2\pi$) と波動関数はもとに戻り，波動関数の一価性が満足されていることがわかる．

次に，$\hat{L}_x, \hat{L}_y$ を極座標表示すると，

$$L_x = i\hbar\left(\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \tag{2.67}$$

$$L_y = i\hbar\left(-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right). \tag{2.68}$$

これから，

$$L_+ = \hbar e^{i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right), \tag{2.69}$$

$$L_- = -\hbar e^{-i\phi}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right) \tag{2.70}$$

が得られる．$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = \hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_z^2 - \hbar\hat{L}_z$ を使うと，

$$\hat{\boldsymbol{L}}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right] \tag{2.71}$$

であることがわかる．$Y_L^M(\theta,\phi) = A_L^M e^{iM\phi}$ とおくと A_L^M の満足すべき方程式は，(2.63) と (2.71) から

$$\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d}{d\theta}\right) - \frac{M^2}{\sin^2\theta}\right]A_L^M = -L(L+1)A_L^M \tag{2.72}$$

となる．この解は，特殊関数の知識を用いて解くこともできるが，それは後に回して，ここでは初等的な方法で解を求めよう．

まず，$\langle\theta,\phi|\hat{L}_-|L,-L\rangle = 0$ に (2.70) を代入すると，

$$\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\theta,\phi|L,-L\rangle = 0. \tag{2.73}$$

これに $\langle\theta,\phi|L,-L\rangle = A_L^{-L}(\theta)e^{-iL\phi}$ を代入すると，

$$\frac{dA_L^{-L}}{d\theta} - L\cot\theta A_L^{-L} = 0. \tag{2.74}$$

この解は，

$$A_L^{-L}(\theta) = c(\sin\theta)^L \tag{2.75}$$

で与えられる．ここで，c は Y_L^{-L} 全立体角での積分が 1 に等しくなるように決められる．すなわち，

$$\int d\Omega\, |Y_L^{-L}|^2 = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin\theta\, d\theta\, [A_L^{-L}(\theta)]^2$$
$$= 2\pi c^2 \int_0^{\pi} (\sin\theta)^{2L+1}$$
$$= 4\pi c^2 \frac{2^{2L}(L!)^2}{(2L+1)!}$$
$$= 1. \tag{2.76}$$

よって，

$$c = \frac{1}{2^L L!}\sqrt{\frac{(2L+1)!}{4\pi}} \tag{2.77}$$

が得られる．ここで，c の位相因子は 1 に選んだ．次に，A_L^M と A_L^{M-1} を結びつける漸化式を求める．このために，

$$|L, M\rangle = \frac{1}{\hbar\sqrt{(L-M+1)(L+M)}}\hat{L}_+|L, M-1\rangle \tag{2.78}$$

の左側から $\langle\theta,\phi|$ を作用させて，(2.69) を代入すると，

$$A_L^M(\theta)e^{iM\phi}$$
$$= \frac{e^{i\phi}}{\sqrt{(L-M+1)(L+M)}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} + i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)A_L^{M-1}(\theta)e^{i(M-1)\phi}$$
$$= \frac{e^{iM\phi}}{\sqrt{(L-M+1)(L+M)}}\left(\frac{\partial}{\partial\theta} - (M-1)\cot\theta\right)A_L^{M-1}(\theta)$$
$$= -\frac{e^{iM\phi}}{\sqrt{(L-M+1)(L+M)}}(\sin\theta)^M\frac{d}{d(\cos\theta)}[(\sin\theta)^{-(M-1)}A_L^{M-1}(\theta)].$$

この漸化式を $L+M$ 回使って，(2.75) を代入すると，

$$A_L^M(\theta) = c(-1)^{L+M}\sqrt{\frac{(L-M)!}{(2L)!\,(L+M)!}}(\sin\theta)^M\frac{d^{L+M}}{d(\cos\theta)^{L+M}}(\sin\theta)^{2L}.$$

よって，

$$Y_L^M(\theta,\phi) = \frac{(-1)^{L+M}}{2^L L!}\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}\frac{(L-M)!}{(L+M)!}}e^{iM\phi}(\sin\theta)^M$$
$$\times\frac{d^{L+M}}{d(\cos\theta)^{L+M}}(\sin\theta)^{2L}. \tag{2.79}$$

が得られる[3]．一般に，次の関係式が成立する．

$$Y_L^{-M}(\theta,\phi)=(-1)^M[Y_L^M(\theta,\phi)]^*. \tag{2.80}$$

空間座標の符号を変える変換 ($\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r}$) を**パリティ変換**という．これは極座標を

$$r\to r,\quad \theta\to\pi-\theta,\quad \phi\to\phi+\pi$$

と変換することに相当する．このとき，(2.79) より $Y_L^M(\theta,\phi)$ は $(-1)^L Y_L^M(\theta,\phi)$ と変換される．したがって，L が偶 (奇) 数の波動関数はパリティ変換に対して符号を変えない (変える)．このとき，系は**偶のパリティ** (**奇のパリティ**) をもつという．

L が大きい場合は，$Y_L^L\propto(\sin\theta)^L$ は，ほとんど xy 平面に局在している．これは，角運動量が z 軸方向に向いた粒子が xy 平面内で運動するという古典的描像と一致する．同様に，Y_L^0 は，ほとんど z 軸方向に局在している．

最後に特殊関数を用いた解法も参考のために述べる．(2.72) で，$x=\cos\theta$ とおくと，(2.72) は次のように書き換えられる．

$$(1-x^2)\frac{d^2A_L^M}{dx^2}-2x\frac{dA_L^M}{dx}+\left[L(L+1)-\frac{M^2}{1-x^2}\right]A_L^M=0 \qquad (-1\le x\le 1). \tag{2.81}$$

この微分方程式は L と M が整数のとき，一価の連続解をもつことが知られている．特に，$|M|\le L$ な場合は，**陪ルジャンドル多項式**として知られる，$-1\le x\le 1$ で有界な解

$$P_L^M(x)=\frac{(1-x^2)^{\frac{M}{2}}}{2^L L!}\frac{d^{L+M}}{dx^{L+M}}(x^2-1)^L \qquad (-L\le M\le L) \tag{2.82}$$

をもつ．特に，$M=0$ の場合は，$P_L^0(x)$ は**ルジャンドル多項式**

---

3) $\langle\theta,\phi|\hat{L}_+|L,L\rangle=0$ に (2.69) を代入して，(2.73)–(2.77) と同様な計算をすると，

$$A_L^L(\theta)=\frac{(-1)^L}{2^L L!}\sqrt{\frac{(2L+1)!}{4\pi}}(\sin\theta)^L$$

が得られる．ここで，位相因子 $(-1)^L$ は以下の結果が (2.79) と一致するように選ばれた．(2.78) 以下と同様な計算を行うと，

$$Y_L^M(\theta,\phi)=\frac{(-1)^L}{2^L L!}\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}\frac{(L+M)!}{(L-M)!}}\,e^{iM\phi}(\sin\theta)^{-M}\frac{d^{L-M}}{d(\cos\theta)^{L-M}}(\sin\theta)^{2L}$$

が得られる．これは外見は異なるが，(2.79) と同等であることが示せる．

$$P_L(x) = \frac{1}{2^L L!}\frac{d^L}{dx^L}(x^2-1)^L \tag{2.83}$$

に等しい．

$A_L^M(\theta)$ は比例定数を除いて $P_L^M(\cos\theta)$ で与えられる．$P_L^M(x)$ は正規直交条件

$$\int_0^\infty e^{-x}x^M P_L^M(x)P_{L'}^M(x)\,dx = \frac{(L+M)!}{L!}\delta_{L,L'} \tag{2.84}$$

を満足する．Y_L^M の正規直交条件 (2.62) を満足するように係数を決めると，

$$Y_L^M(\theta,\phi) = (-1)^{\frac{M+|M|}{2}}\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}\frac{(L-|M|)!}{(L+|M|)!}}P_L^{|M|}(\cos\theta)e^{iM\phi} \tag{2.85}$$

が得られる．特に，$M=0$ の場合は，

$$Y_L^0(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}P_L(\cos\theta). \tag{2.86}$$

球面調和関数の完全性条件は，

$$\begin{aligned}\sum_{L=0}^{\infty}\sum_{M=-L}^{L} Y_L^{M^*}(\theta,\phi)Y_L^M(\theta',\phi') &= \frac{1}{\sin\theta}\delta(\theta-\theta')\delta(\phi-\phi') \\ &\equiv \delta(\Omega-\Omega')\end{aligned} \tag{2.87}$$

で与えられる．

最後に，いくつかの例を書き下しておく．

$$\left.\begin{aligned}
&Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\
&Y_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta e^{\pm i\phi}, \qquad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \\
&Y_2^{\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta e^{\pm2i\phi}, \qquad Y_2^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{\pm i\phi}, \\
&Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1), \\
&Y_3^{\pm3} = \mp\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\sin^3\theta e^{\pm3i\phi}, \qquad Y_3^{\pm2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}}\sin^2\theta\cos\theta e^{\pm2i\phi}, \\
&Y_3^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)e^{\pm i\phi}, \\
&Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\cos\theta(5\cos^2\theta-3).
\end{aligned}\right\} \tag{2.88}$$

2.2.2 スピン角運動量

多くの素粒子や複合粒子は，静止系においてもスピンとよばれる角運動量 $\hbar S$ をもつことが実験的に知られている．静止系では軌道角運動量は 0 なので，**スピン角運動量**は粒子の実空間での運動ではなく，その**内部自由度**に由来するものであると考えられる．軌道角運動量の古典極限は $\hbar L$ を一定に保ちつつ，$\hbar \to 0, L \to \infty$ なる極限をとることにより得られる．これに対して，素粒子のスピンの値 S は粒子に固有の定数なので[4)]，古典極限 $\hbar \to 0$ をとると消えてしまう．このように，スピン角運動量は古典対応をもたない量子数である．

スピン角運動量 $\hbar S$ は空間座標に依存しないので，軌道角運動量と違って波動関数の一価性の制約は受けず，整数と半整数の両方の値をとりうる．

$$S = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ 2,\ \cdots . \tag{2.89}$$

軌道角運動量の場合と同様に，スピンが $\hbar S$ の粒子の波動関数は，$2S+1$ 個の成分 $\Psi_M(x,y,z)$ $(M = S, S-1, \cdots, -S)$ をもっている．電子の場合は，磁場をかけるとエネルギー準位が 2 倍に分裂することから内部自由度が 2 であり，したがって，電子のスピンは $\hbar/2$ であることがわかる．陽子や中性子のスピンも $\hbar/2$ である．

軌道角運動量は波動関数の空間座標に作用したが，スピン角運動量は内部自由度に作用し，$2S+1$ 個の成分間の変換をもたらす (空間座標には影響しない)．角運動量は空間回転に対する波動関数の変換則を決める生成子である (2.1 節参照) ので，スピン角運動量の各成分の交換関係は軌道角運動量の場合と同じで，

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z, \qquad [\hat{S}_y, \hat{S}_z] = i\hbar\hat{S}_x, \qquad [\hat{S}_z, \hat{S}_x] = i\hbar\hat{S}_y \tag{2.90}$$

で与えられる．本節で導かれた行列要素に関する公式 (2.55), (2.57), (2.58) は交換関係だけから導かれたので，スピンの場合もそのまま成立する．

$$\langle S, M+1|\hat{S}_+|S, M\rangle = \hbar\sqrt{(S-M)(S+M+1)}, \tag{2.91}$$

$$\langle S, M-1|\hat{S}_-|S, M\rangle = \hbar\sqrt{(S+M)(S-M+1)}, \tag{2.92}$$

$$\langle S, M|\hat{S}_z|S, M\rangle = \hbar M. \tag{2.93}$$

---

4) スピンは素粒子を識別する量子数なので，その値が異なる粒子は全く別な粒子であるとみなされる．

特別な場合として，スピンが 1/2 の場合を考えよう．この場合，波動関数は 2 成分あり，$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ のように行列表示できる．スピン演算子を

$$\hat{S}_i = \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_i \qquad (i = x, y, z) \tag{2.94}$$

と書き，$\hat{\sigma}_i$ を**パウリ行列**という．パウリ行列は交換関係

$$[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] = 2i\hat{\sigma}_z, \qquad [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] = 2i\hat{\sigma}_x, \qquad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] = 2i\hat{\sigma}_y \tag{2.95}$$

を満足する．行列要素の公式 (2.93) を用いてパウリ行列を書き下すと，

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{2.96}$$

となる．パウリ行列は，エルミートでかつユニタリーであり，

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{1} \tag{2.97}$$

を満足する．ここで，$\hat{1}$ は 2 行 2 列の単位行列

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.98}$$

である．パウリ行列は，(2.95) の交換関係に加えて反交換関係

$$\{\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y\} = 0, \qquad \{\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z\} = 0, \qquad \{\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x\} = 0 \tag{2.99}$$

を満足する．ここで，$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ である．

任意の 2 行 2 列の行列は，パウリ行列 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ と単位行列 $\hat{1}$ だけで表現できる．特に，パウリ行列を掛け合わせた式は，パウリ行列の線形和として書ける．例えば，

$$\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = i\hat{\sigma}_z, \qquad \hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = i\hat{\sigma}_x, \qquad \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x = i\hat{\sigma}_y. \tag{2.100}$$

(2.97) と (2.100) を合わせると次の公式が得られる．

$$\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j = \hat{1}\delta_{i,j} + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k. \tag{2.101}$$

ここで，ϵ_{ijk} は，(i, j, k) が (x, y, z) の偶置換の場合は 1，奇置換の場合は -1，その他の場合 (すなわち i, j, k の 2 個以上が一致する場合) は 0 となる記号で，**エディントンのイプシロン**とよばれる．パウリ行列はこのほかにも多くの有用な性質をもっている．そのいくつかを問題としてあげておく．

問題 2.1 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ を任意の 3 次元ベクトルとして次の関係式を証明せよ．

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{A})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} + i\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}). \tag{2.102}$$

ここで，演算子とベクトルの内積は，$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{A} = \hat{\sigma}_x A_x + \hat{\sigma}_y A_y + \hat{\sigma}_z A_z$ などと定義されるものとする．

【解答】 (2.101) を用いると，

$$\begin{aligned}(2.102)\text{ の左辺} &= \sum_{i,j=x,y,z} \hat{\sigma}_i \hat{\sigma}_j A_i B_j \\ &= \sum_{i,j=x,y,z} (\hat{1}\delta_{i,j} + i\epsilon_{ijk}\hat{\sigma}_k) A_i B_j \\ &= \sum_{i=x,y,z} A_i B_i + i \sum_{k=x,y,z} \hat{\sigma}_k (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})_k \\ &= \text{右辺}.\end{aligned}$$

∎

問題 2.2 次式を示せ．

$$e^{-\frac{i}{2}\theta\hat{\sigma}_i} = \hat{1}\cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\sigma}_i \sin\frac{\theta}{2} \qquad (i = x, y, z). \tag{2.103}$$

【解答】 指数関数を展開した式を偶数べきと奇数べきに分けて，$\hat{\sigma}_i^2 = \hat{1}$ を使うと，

$$\begin{aligned}e^{-\frac{i}{2}\theta\hat{\sigma}_i} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n)!}\left(-\frac{i}{2}\theta\right)^{2n} \hat{\sigma}_i^{2n} + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!}\left(-\frac{i}{2}\theta\right)^{2n+1} \hat{\sigma}_i^{2n+1} \\ &= \hat{1}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n} - i\hat{\sigma}_i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!}\left(\frac{\theta}{2}\right)^{2n+1} \\ &= \hat{1}\cos\frac{\theta}{2} - i\hat{\sigma}_i \sin\frac{\theta}{2}.\end{aligned}$$

∎

(2.103) より，波動関数 $\psi = \begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix}$ は，任意の軸 $i = x, y, z$ のまわりに 2π 回転させてももとには戻らず，

$$e^{-\frac{i}{2}(2\pi)\hat{\sigma}_i}\psi = -\psi \tag{2.104}$$

のように符号が反対になることがわかる．このように，スピン 1/2 の系は，与えられた角度 θ に対して，波動関数が $\pm e^{-\frac{i}{2}\theta\hat{\sigma}_i}\chi$ の 2 通り存在する．このことを **2 価表現**という．

2.2.3 角運動量の合成

2 つの独立な系の角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}_1$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ の合成角運動量

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{J}}_1 + \hat{\boldsymbol{J}}_2 \tag{2.105}$$

を考える．$\hat{\boldsymbol{J}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ は独立なので，$\hat{\boldsymbol{J}}$ の各成分もまた，スピンの交換関係を満足する．

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \qquad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \qquad [\hat{J}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{J}_y. \tag{2.106}$$

$\hat{\boldsymbol{J}}_1^2 = \hbar^2 J_1(J_1+1)$，$\hat{J}_{1z}$，$\hat{\boldsymbol{J}}_2^2 = \hbar^2 J_2(J_2+1)$，$\hat{J}_{2z}$ が互いに交換するので，量子状態は，これらの同時固有状態 $|J_1, M_1; J_2, M_2\rangle \equiv |M_1, M_2\rangle$ で記述できる． ここで，$\hbar M_1$, $\hbar M_2$ は，それぞれ $\hat{J}_{1z}$ と $\hat{J}_{2z}$ の固有値である．他方，$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hbar^2 J(J+1)$, $\hat{\boldsymbol{J}}_1^2, \hat{\boldsymbol{J}}_2^2$ および $\hat{\boldsymbol{J}}$ の z 成分

$$\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z} \tag{2.107}$$

も互いに交換するので，合成系の状態は，これらの同時固有状態 $|J, M; J_1, J_2\rangle \equiv |J, M\rangle$ でも記述される．ここで，$\hbar M$ は $\hat{J}_z$ の固有値である．

まず，(2.107) より

$$M = M_1 + M_2 \tag{2.108}$$

である．次に，J の値を求めるために (2.105) の両辺を 2 乗すると，

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{J}}^2 &= \hat{\boldsymbol{J}}_1^2 + \hat{\boldsymbol{J}}_2^2 + 2\hat{\boldsymbol{J}}_1\hat{\boldsymbol{J}}_2 \\ &= \hbar^2 J_1(J_1+1) + \hbar^2 J_2(J_2+1) + \hat{J}_{1+}\hat{J}_{2-} + \hat{J}_{1-}\hat{J}_{2+} + 2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}\end{aligned} \tag{2.109}$$

が得られる．ここで，

$$\hat{J}_{i\pm} \equiv \hat{J}_{ix} \pm i\hat{J}_{iy} \qquad (i = 1, 2) \tag{2.110}$$

である．

(2.109) を状態 $|M_1 = J_1,\ M_2 = J_2\rangle$ に作用させると，

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2 |J_1, J_2\rangle = \hbar^2(J_1+J_2)(J_1+J_2+1)|J_1, J_2\rangle \tag{2.111}$$

が得られるので，状態 $|J_1, J_2\rangle$ の全角運動量は，$J = J_1 + J_2$ であることがわかる．よって，

$$|J = J_1 + J_2, M = J_1 + J_2\rangle = |M_1 = J_1, M_2 = J_2\rangle. \tag{2.112}$$

この両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を作用させると，

$$\sqrt{2(J_1+J_2)}|J_1+J_2, J_1+J_2-1\rangle$$
$$= \sqrt{2J_1}|J_1-1, J_2\rangle + \sqrt{2J_2}|J_1, J_2-1\rangle.$$

これから，

$$|J_1+J_2, J_1+J_2-1\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{J_1}{J_1+J_2}}|J_1-1, J_2\rangle + \sqrt{\frac{J_2}{J_1+J_2}}|J_1, J_2-1\rangle \tag{2.113}$$

が得れらる．(2.113) の両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を作用させると，全角運動量が J_1+J_2 で磁気量子数が J_1+J_2-2 の状態

$$|J_1+J_2, J_1+J_2-2\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{(J_1+J_2)(2J_1+2J_2-1)}}\Big[\sqrt{J_1(2J_1-1)}|J_1-2, J_2\rangle$$
$$+2\sqrt{J_1J_2}|J_1-1, J_2-1\rangle + \sqrt{J_2(2J_2-1)}|J_1, J_2-2\rangle\Big] \tag{2.114}$$

が得られる．同様の操作をくり返すことにより，全角運動量が J_1+J_2 のすべての状態が得られる．

全角運動量が J_1+J_2-1 の状態のうち磁気量子数が最大の状態は，(2.113) に直交する状態である．

$$|J_1+J_2-1, J_1+J_2-1\rangle$$
$$= \sqrt{\frac{J_1}{J_1+J_2}}|J_1, J_2-1\rangle - \sqrt{\frac{J_2}{J_1+J_2}}|J_1-1, J_2\rangle. \tag{2.115}$$

実際，右辺に (2.109) を作用させると，全角運動量が J_1+J_2-1 となっていることがわかる．(2.115) の両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を作用させると，

$$|J_1+J_2-1, J_1+J_2-2\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{(J_1+J_2)(2J_1+2J_2-3)}}\Big[\sqrt{J_1(2J_2-1)}|J_1, J_2-2\rangle$$
$$+(J_1-J_2)|J_1-1, J_2-1\rangle - \sqrt{J_2(2J_1-1)}|J_1-2, J_2\rangle\Big] \tag{2.116}$$

が得られる．(2.116) の両辺に $\hat{J}_- = \hat{J}_{1-} + \hat{J}_{2-}$ を順次作用させることにより，全角運動量が J_1+J_2-1 のすべての状態が得られる．

全角運動量が J_1+J_2-2 で磁気量子数が最大の状態は，(2.114) と (2.116) の両方に直交する状態である．同様の操作をくり返すことにより，全角運動量

が 1 ずつ小さい状態が構成できる．この操作は，$J_2 > J_1$ の場合は全角運動量が $J_2 - J_1$ となるまで，逆の場合は $J_1 - J_2$ となるまで新しい状態が作り出される．こうして，全角運動量が，

$$J_1 + J_2,\ J_1 + J_2 - 1,\ \cdots, |J_1 - J_2| \tag{2.117}$$

で与えられるすべての角運動量状態が構成される．直感的には，(2.117) のそれぞれの状態は，角運動量ベクトル $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ が，平行から反平行までの離散的な相対角度をとる状態に対応していると考えられる．

角運動量が J の状態は，$2J+1$ 個の成分をもつので全部で，

$$\sum_{J=|J_1-J_2|}^{J_1+J_2} (2J+1) = (2J_1+1)(2J_2+1) \tag{2.118}$$

個の状態が構成される．これは，もとの状態 $|J_1, M_1; J_2, M_2\rangle$ の状態数に一致している．

問題 2.3 スピン 1/2 の粒子が 2 個ある場合の合成系の状態をすべて求めよ．

【解答】 合成スピンの大きさは 1 または 0 であり，各状態は上記 (2.112)–(2.116) の方法に従って次のように与えられる．

$$\begin{aligned}
|1,1\rangle &= \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \\
|1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right), \\
|1,-1\rangle &= \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, \\
|0,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right).
\end{aligned}$$

∎

問題 2.4 スピン 1/2 の粒子が 3 個ある場合の合成系の状態をすべて求めよ．

【解答】 合成スピンの大きさは 3/2 または 1/2 である．前者は次のように与えられる．

$$\begin{aligned}
\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle &= \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, \\
\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right), \\
\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \left|-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\right),
\end{aligned}$$

$$\left|\frac{3}{2},-\frac{3}{2}\right\rangle=\left|-\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle.$$

後者は $\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ に直交するように選ばれる．それを

$$\alpha\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle+\beta\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle+\gamma\left|-\frac{1}{2},\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle \tag{2.119}$$

と書くと，これが $\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$ と直交することから $\alpha+\beta+\gamma=0$．さらに，規格化の条件より $\alpha^2+\beta^2+\gamma^2=1$ である（簡単のため係数は実数にとる）．これから，合成スピンの大きさが 1/2 の状態は二組存在して，それぞれに対する係数 (α,β,γ) の組は，

$$\left(\alpha,\frac{1}{2}\left[-\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}\right],-\frac{1}{2}\left[\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}\right]\right),$$
$$\left(\alpha,-\frac{1}{2}\left[\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}\right],\frac{1}{2}\left[-\alpha+\sqrt{2-3\alpha^2}\right]\right)$$

で与えられる．ここで，α は $|\alpha|\le\sqrt{2/3}$ を満足する任意の実数である． ■

2.3 密度演算子

密度演算子は，波動関数の広がりに由来する量子力学的不確定性と，原理的には知り得る知識が実際上不足していることに由来する統計的不確定性の両方を，統一的に取り扱うことを可能にする数学的道具である．量子力学において，系の完全な情報は波動関数または状態ベクトル $|\Psi\rangle$ で与えられる．このとき系は，**純粋状態**にあるといい，これに対応する密度演算子は，

$$\hat{\rho}=|\Psi\rangle\langle\Psi| \tag{2.120}$$

と定義される．純粋状態の密度演算子は，条件

$$\hat{\rho}^2=|\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle\langle\Psi|=|\Psi\rangle\langle\Psi|=\hat{\rho} \tag{2.121}$$

を満足する．これを**冪等条件**（べき）という．逆に，冪等条件が満足されているとき系は純粋状態にある．

次に，我々が対象に関する完全な情報をもっておらず，互いに直交する状態 $\{|n\rangle\}$ のうちで，系が n 番目にある確率が p_n で与えられる場合を考える．このとき，密度行列は，

$$\hat{\rho}=\sum_n p_n|n\rangle\langle n| \tag{2.122}$$

で与えられる．この場合，$\hat{\rho}^2$ は，

$$\hat{\rho}^2 = \sum_n p_n^2 |n\rangle\langle n| \tag{2.123}$$

となるので，任意の状態 $|\Psi\rangle$ に対して $\langle\Psi|\rho^2|\Psi\rangle \le \langle\Psi|\rho|\Psi\rangle$ である．ここで，不等号が成立するとき，系は**混合状態**にあるという．等号が成立するのは，ある 1 つの p_n だけが 1 に等しく残りは 0 となる場合で，系は純粋状態にある．

密度演算子 $\hat{\rho}$ が与えられたとき，系が状態 $|n\rangle$ にある確率は，(2.122) から

$$p_n = \langle n|\hat{\rho}|n\rangle \tag{2.124}$$

で与えられることがわかる．直交するすべての可能な状態の確率の和は 1 に等しくなければならないので，

$$\sum_n p_n = \sum_n \langle n|\hat{\rho}|n\rangle \equiv \mathrm{Tr}\hat{\rho} = 1 \tag{2.125}$$

が得られる．(2.125) を**トレース条件**という．ここで，Tr は**トレース**とよばれる演算で，任意の演算子 $\hat{O}$ に対して，

$$\mathrm{Tr}\,\hat{O} \equiv \sum_n \langle n|\hat{O}|n\rangle \tag{2.126}$$

で定義される．

問題 2.5 トレース演算が基底の取り方に依存しないこと，すなわち，(2.126) の右辺が任意の正規直交完全系に対して同じ値をとることを示せ．

【解答】 異なる正規直交完全系 $\{|n\rangle\}$ と $\{|\alpha\rangle\}$ に対する演算子 $\hat{O}$ のトレースが，同じ値を与えることを示す．$\{|n\rangle\}$ の完全性条件 $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$ を $\hat{O}$ の両側に挿入すると，

$$\begin{aligned}\sum_\alpha \langle\alpha|\hat{O}|\alpha\rangle &= \sum_{\alpha,n,n'} \langle\alpha|n\rangle\langle n|\hat{O}|n'\rangle\langle n'|\alpha\rangle \\ &= \sum_{\alpha,n,n'} \langle n|\hat{O}|n'\rangle\langle n'|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle \\ &= \sum_{n,n'} \langle n|\hat{O}|n'\rangle\langle n'|n\rangle = \sum_n \langle n|\hat{O}|n\rangle.\end{aligned}$$

■

問題 2.6 任意の演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して，

$$\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A}) \tag{2.127}$$

が成立することを示せ．より一般に $\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}\hat{C}) = \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{C}\hat{A}) = \mathrm{Tr}(\hat{C}\hat{A}\hat{B})$ が成立する．これを**トレースの循環性**という．

【解答】 $\{|n\rangle\}$ の完全性条件 $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$ を挿入すると,

$$
\begin{aligned}
\mathrm{Tr}(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_n \langle n|\hat{A}\hat{B}|n\rangle = \sum_{n,n'} \langle n|\hat{A}|n'\rangle\langle n'|\hat{B}|n\rangle \\
&= \sum_{n,n'} \langle n'|\hat{B}|n\rangle\langle n|\hat{A}|n'\rangle = \sum_{n'} \langle n'|\hat{B}\hat{A}|n'\rangle \\
&= \mathrm{Tr}(\hat{B}\hat{A}).
\end{aligned}
$$

■

密度演算子とトレースを用いると，オブザーバブルの量子統計的期待値を特定の基底によらない形で表現できる．例えば，一般のオブザーバブル $\hat{O}$ の期待値は,

$$
\langle\hat{O}\rangle \equiv \sum_n p_n \langle n|\hat{O}|n\rangle = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}) \tag{2.128}
$$

と書ける．

一般に，すべての n に対して，正値性条件 $p_n \geq 0$ とトレース条件 (2.125) を満足する演算子を**密度演算子**という．これから密度演算子は，正値エルミート演算子であることがわかる．正値エルミート演算子 $\hat{\rho}$ の固有値 $p_n(\geq 0)$ と対応する固有状態を $|n\rangle$ とすると，固有方程式は $\hat{\rho}|n\rangle = p_n|n\rangle$ である．両辺の右側からケットベクトル $\langle n|$ を掛けて，n についての和をとると,

$$
\hat{\rho}\sum_n |n\rangle\langle n| = \sum_n p_n|n\rangle\langle n|.
$$

$\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}$ なので，密度演算子は常に (2.122) のように対角表示にできることがわかる．

いま，(2.122) に 2 つの正規直交完全基底 $\{|\psi_k\rangle\}$ と $\{|\chi_k\rangle\}$ の完全系を挿入すると,

$$
\begin{aligned}
\hat{\rho} &= \sum_n p_n \left(\sum_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|\right)|n\rangle\langle n|\left(\sum_l |\chi_l\rangle\langle\chi_l|\right) \\
&= \sum_{k,l} w_{kl}|\psi_k\rangle\langle\chi_l|.
\end{aligned} \tag{2.129}
$$

ここで,

$$
w_{kl} = \sum_n p_n \langle\psi_k|n\rangle\langle n|\chi_l\rangle = \langle\psi_k|\sum_n p_n|n\rangle\langle n|\chi_l\rangle = \langle\psi_k|\hat{\rho}|\chi_l\rangle \tag{2.130}
$$

である．特に，$|\psi_k\rangle = |\chi_k\rangle$ でかつ，これが $\hat{\rho}$ の固有状態であるように選ぶと w_{kl} は対角的 $(w_{kl} = w_k\delta_{kl})$ となり，$\hat{\rho}$ は対角化される．

$$\hat{\rho} = \sum_n w_k |\psi_k\rangle\langle\psi_k|. \tag{2.131}$$

しかし，$\{|\psi_k\rangle\}$ は固有値が縮退している場合は，一般に $\{|n\rangle\}$ とは異なる．このように，密度演算子を対角的に表示する方法は，必ずしも一意ではないことに注意する必要がある．にもかかわらず，それを用いて計算される物理量のあらゆる期待値は，対角化される表示にはよらず同じ値となる．

問題 2.7　正規直交基底 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ で張られる，2 次元のヒルベルト空間で定義された密度演算子

$$\hat{\rho} = p|0\rangle\langle 0| + (1-p)|1\rangle\langle 1| \qquad (0 \le p \le 1) \tag{2.132}$$

を考える．この $\hat{\rho}$ を対角表示する別の基底が存在するための条件を考察せよ．

【解答】　ρ を対角表示するような別な基底 $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$ が存在すると仮定しよう．これはもとの基底とユニタリー変換で結ばれていなければならないので，

$$\begin{pmatrix} |0\rangle \\ |1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\alpha\rangle \\ |\beta\rangle \end{pmatrix}. \tag{2.133}$$

ただし，$|a|^2 + |b|^2 = 1$ である．これを (2.132) に代入すると，

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= [p|a|^2 + (1-p)|b|^2]|\alpha\rangle\langle\alpha| + [p|b|^2 + (1-p)|a|^2]|\beta\rangle\langle\beta| \\ &\quad + ab^*(2p-1)|\alpha\rangle\langle\beta| + a^*b(2p-1)|\beta\rangle\langle\alpha|. \end{aligned}$$

右辺の非対角項が消えるためには，$a=0$，$b=0$，$p=1/2$ のいずれかが成立しなければならないが，最初の 2 つの条件からは新しい対角表示は生まれない．したがって，$p=1/2$ でなければならない．このとき，$|a|^2+|b|^2=1$ を満足する任意の複素数 a, b に対して，対角表示

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}[|\alpha\rangle\langle\alpha| + |\beta\rangle\langle\beta|]$$

が得られる．　■

全系が A と B の 2 つの部分から成り立っている場合を考え，全系の密度演算子を $\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}}$ と書こう．これが密度演算子であるための条件は，正値性とトレース条件である．まず，正値性から $\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}}$ を対角化する表示が存在して，対角成分は非負である．すなわち，

$$\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}} = \sum_n p_n |\psi_n\rangle_{\mathrm{A\,A}}\langle\psi_n| \otimes |\chi_n\rangle_{\mathrm{B\,B}}\langle\chi_n|. \tag{2.134}$$

全系の状態を知る必要はなく，系 A の状態だけに関心がある場合を考えよう．このとき，系 B についてのみトレースをとることによって，部分系 A の密度演算子を得ることができる．公式

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle\chi_n|) &= \sum_m {}_{\mathrm{B}}\langle m|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle\chi_n|m\rangle_{\mathrm{B}} \\ &= {}_{\mathrm{B}}\langle\chi_n|\sum_m |m\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle m|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}} \\ &= {}_{\mathrm{B}}\langle\chi_n|\chi_n\rangle_{\mathrm{B}} = 1 \end{aligned} \tag{2.135}$$

を用いると，

$$\hat{\rho}^{\mathrm{A}} \equiv \mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}(\hat{\rho}^{\mathrm{A+B}}) = \sum_n p_n|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{A}}\langle\psi_n| \tag{2.136}$$

が得られる．ここで，Tr_{B} は系 B に対してのみトレースをとることを意味する．$\hat{\rho}^{\mathrm{A}}$ を系 A に対する**還元密度演算子**という．系 A だけに関係する物理量 $\hat{O}^{\mathrm{A}}$ を問題にする限り，$\hat{\rho}^{\mathrm{A}}$ と $\hat{\rho}$ のいずれを用いて計算しても同じ結果が得られる．すなわち，

$$\mathrm{Tr}_{\mathrm{A}}(\hat{\rho}^{\mathrm{A}}\hat{O}^{\mathrm{A}}) = \mathrm{Tr}(\hat{\rho}\,\hat{O}^{\mathrm{A}}). \tag{2.137}$$

問題 2.8 (2.137) を示せ．

【解答】 (2.136) を代入すると (2.137) の左辺は，

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}_{\mathrm{A}}(\hat{\rho}^{\mathrm{A}}\hat{O}^{\mathrm{A}}) &\equiv \sum_n {}_{\mathrm{A}}\langle\psi_n|\hat{\rho}^{\mathrm{A}}\hat{O}^{\mathrm{A}}|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}} \\ &= \sum_n p_n\,{}_{\mathrm{A}}\langle\psi_n|\hat{O}^{\mathrm{A}}|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}}\end{aligned}$$

となる．右辺は (2.134) を代入すると，

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\hat{\rho}\hat{O}^{\mathrm{A}}) &\equiv \sum_{m,n} {}_{\mathrm{A}}\langle\psi_n|{}_{\mathrm{B}}\langle\chi_m|\hat{\rho}\hat{O}^{\mathrm{A}}|\chi_m\rangle_{\mathrm{B}}|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}} \\ &= \sum_{m,n} {}_{\mathrm{A}}\langle\psi_n|{}_{\mathrm{B}}\langle\chi_m|\sum_k p_k|\psi_k\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{A}}\langle\psi_k|\otimes|\chi_k\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{B}}\langle\chi_k|\hat{O}^{\mathrm{A}}|\chi_m\rangle_{\mathrm{B}}|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}} \\ &= \sum_{m,n,k} p_k\,{}_{\mathrm{A}}\langle\psi_n|\psi_k\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{B}}\langle\chi_m|\chi_k\rangle_{\mathrm{B}\,\mathrm{A}}\langle\psi_k|\hat{O}^{\mathrm{A}}|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}\,\mathrm{B}}\langle\chi_k|\chi_m\rangle_{\mathrm{B}} \\ &= \sum_n p_n\,{}_{\mathrm{A}}\langle\psi_n|\hat{O}^{\mathrm{A}}|\psi_n\rangle_{\mathrm{A}}.\end{aligned}$$

∎

2.4　測定の理論

最近の実験技術の進歩により，量子状態を光子や原子が1個あるいは数個のレベルで人工制御することが可能になっている．そのためには，少数の量子を人工制御するうえで，量子状態が測定行為によってどのように変化するかを理解することが不可欠となっている．いわゆる**観測の理論**は観測による波束の収縮の起源を議論するが，これは本節の目的ではない．ここでは，観測によって波束の収縮が起こることを前提として，ある事象が観測される確率とそれに伴う量子状態の変化を記述する**測定の理論**について述べる．

操作的測定理論

測定の理論としては，本節で述べるフォン・ノイマンによる**射影仮説**に基づく理論が有名であるが，この理論が適用できない例も数多く存在する．そこで，ここではまず，現在量子光学や量子情報の分野で広く用いられている**操作的量子測定理論**を紹介する[5)]．これは特別な場合として，フォン・ノイマンの測定理論を含んでいる．

量子力学的測定は，それが行われる時刻からみて，過去に対する役割と未来に対する役割が全く異なっている．過去に対する役割は，同じ量子状態に用意された多数の系に対する測定をくり返すことにより，量子論で予言された確率分布が再現されることを確かめることである．未来に対する役割は，おのおのの測定結果に依存した測定直後の量子状態を与えることである．シュレーディンガー方程式は，時間反転に対して対称 ($\Psi(t)$ が解であれば $\Psi^*(-t)$ も解である) であるが，測定過程における非対称性のためにある測定が行われた時点の以前と以後は時間反転対称性が失われてしまう．

操作的測定理論によると，測定過程は**測定演算子**とよばれる線形演算子の集合 $\{\hat{A}_m\}$ で記述される．ここで，m は測定値を区別する指標である．測定演算子は次の2つの事柄を記述する．

- 状態 $|\Phi\rangle$ に対して測定値 m が観測される確率 $P(m)$

$$P(m) = \|\hat{A}_m|\Phi\rangle\|^2 = \langle\Phi|\hat{A}_m^\dagger\hat{A}_m|\Phi\rangle. \tag{2.138}$$

5) E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic Press, London, 1976); K. Kraus, *States, Effects, and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory*, Lecture Notes in Physics, Vol. 190 (Springer, Berlin, 1983).

- 測定直後の状態 $|\Phi'\rangle$

$$|\Phi'\rangle = \frac{\hat{A}_m|\Phi\rangle}{\|\hat{A}_m|\Phi\rangle\|} = \frac{\hat{A}_m|\Phi\rangle}{\sqrt{\langle\Phi|\hat{A}_m^\dagger \hat{A}_m|\Phi\rangle}}. \tag{2.139}$$

すべての測定値に対する確率の和は 1 でなければならないので，

$$\sum_m P(m) = \sum_m \langle\Phi|\hat{A}_m^\dagger \hat{A}_m|\Phi\rangle = \langle\Phi|\sum_m \hat{A}_m^\dagger \hat{A}_m|\Phi\rangle = 1. \tag{2.140}$$

これが任意の規格化された状態 $|\Phi\rangle$ に対して成立するためには，測定演算子は完全性条件

$$\sum_m \hat{A}_m^\dagger \hat{A}_m = \hat{I} \tag{2.141}$$

を満足しなければならない．

具体例として，光子を 1 個ずつ検出する**フォトンカウンター**とよばれる測定器を用いた光子数の測定を考えよう．光子数が n 個の光子数状態 $|n\rangle$ に対してある短い時間 dt 測定すると，測定結果は光子が検出されないか，1 個検出されるかのいずれかであり，それぞれの場合に対応する測定演算子を $\hat{A}_0$, $\hat{A}_1$ とする．(測定時間 dt は，dt の間に光子が 2 個以上検出される確率が無視できるくらい短くとる．) 光子が 1 個検出されると，残りの状態は光子数が 1 個少ない状態 $|n-1\rangle$ となるはずである．したがって，$\hat{A}_1$ は消滅演算子 $\hat{a}$ に比例すると考えられるので，

$$\hat{A}_1 = \sqrt{\lambda\, dt}\ \hat{a} \tag{2.142}$$

とおこう．ここで，λ は検出器と光子との結合の強さを特徴づける定数である．実際，このとき光子を 1 個を検出する確率は，(2.138) より

$$P(1) = \langle n|\hat{A}_1^\dagger \hat{A}_1|n\rangle = \lambda n\, dt \tag{2.143}$$

となり，測定される状態に含まれる光子数 n と測定時間 dt に比例するという直観と合致する結果が得られる．光子が観測されない場合の測定演算子 $\hat{A}_0$ は，条件 (2.141) を満足するように決められる．$(dt)^2$ のオーダーの項を無視すると，

$$\hat{A}_0^\dagger \hat{A}_0 = \hat{I} - \lambda \hat{a}^\dagger \hat{a}\, dt = \exp(-\lambda \hat{a}^\dagger \hat{a}\, dt). \tag{2.144}$$

これから，

$$\hat{A}_0 = \exp(i\hat{h}) \exp\left(-\frac{\lambda}{2} \hat{a}^\dagger \hat{a}\, dt\right) \tag{2.145}$$

が得られる．ここで，$\hat{h}$ は観測しない場合 ($\lambda = 0$) に，状態が自由場のハミルトニアン $\hat{H}_0 = \hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}$ (ω は光子の周波数) に従って時間発展するという条件から，$\hat{h} = -\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}\,dt$ となる．

射影測定

測定値 m が測定したいオブザーバブル $\hat{O}$ の固有状態 $|m\rangle$ に対応する固有値である場合，演算子 $\hat{A}_m$ は**射影演算子**

$$\hat{A}_m = |m\rangle\langle m| \tag{2.146}$$

となる．このような測定を**射影測定**という．このとき，(2.138), (2.139) は，それぞれ

$$P(m) = |\langle m|\Phi\rangle|^2, \tag{2.147}$$

$$|\Phi'\rangle = |m\rangle \tag{2.148}$$

となる．射影測定の場合，測定直後の状態は観測された測定値の固有状態となっている．また，(2.147) はボルンの確率解釈に他ならない．

完全性条件 (2.141) は，

$$\sum_m \hat{A}_m^\dagger \hat{A}_m = \sum_m |m\rangle\langle m| = \hat{I} \tag{2.149}$$

となる．これはオブザーバブルの固有状態が満足すべき完全性条件に他ならない．さらに，オブザーバブル $\hat{O}$ は次のようにスペクトル分解できる．

$$\hat{O} = \sum_m m\hat{A}_m^\dagger \hat{A}_m = \sum_m m|m\rangle\langle m|. \tag{2.150}$$

具体例として，スピン 1/2 のスピンを z 軸方向に沿って測定することを考えよう．オブザーバブルとしてパウリ行列の z 成分 $\hat{\sigma}_z$ を考えると，測定値は $m = +1$ と $m = -1$ の 2 通りである．これらの測定値は，それぞれ上向きスピンと下向きスピンの固有状態 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ に対応しているので，(2.146) に従って，

$$\hat{A}_1 = |\uparrow\rangle\langle\uparrow|, \qquad \hat{A}_{-1} = |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \tag{2.151}$$

と書こう．これらは完全性条件 (2.141)

$$\hat{A}_1^\dagger\hat{A}_1 + \hat{A}_{-1}^\dagger\hat{A}_{-1} = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow| = \hat{I} \tag{2.152}$$

を満足しており，また，(2.150) のスペクトル分解も満足する．すなわち，

$$\hat{\sigma}_z = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \tag{2.153}$$

となる．

POVM 測定

測定によって系の状態が完全に破壊される場合や，測定値 m が得られる確率分布 (2.138) にのみに関心がある場合は，測定の演算子として $\hat{A}_m$ の代わりに

$$\hat{M}_m \equiv \hat{A}_m^\dagger \hat{A}_m \tag{2.154}$$

を用いるのが便利である．これは，任意の状態 $|\Phi\rangle$ に対する期待値が，

$$\langle\Phi|\hat{M}_m|\Phi\rangle = \|\hat{A}|\Phi\rangle\|^2 \geq 0 \tag{2.155}$$

のように 0 または正となる．任意の状態に対する期待値が負とならない演算子を**正値演算子**という．測定モデルが正値演算子の集合 $\{\hat{M}_m\}$ から構成されるとき，$\hat{M}_m$ は**正値演算子値測度**，略して POVM (positive operator-valued measure) とよばれる．

3. 電磁場の量子化

3.1 マクスウェル方程式

電荷密度と電流密度が，それぞれ $\rho, \boldsymbol{j}$ で与えられる真空中の電場 $\boldsymbol{E}$ と磁場 $\boldsymbol{B}$ は，次のマクスウェル方程式に従う．

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{B}}{\partial t} \qquad \text{(ファラデーの電磁誘導の法則)}, \tag{3.1}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B} = \epsilon_0 \frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t} + \boldsymbol{j} \qquad \text{(アンペール–マクスウェルの法則)}, \tag{3.2}$$

$$\epsilon_0 \mathrm{div}\boldsymbol{E} = \rho \qquad \text{(電場に関するガウスの法則)}, \tag{3.3}$$

$$\mathrm{div}\boldsymbol{B} = 0 \qquad \text{(磁場に関するガウスの法則)}. \tag{3.4}$$

ここで，$\epsilon_0 = 10^7/4\pi c^2 = 8.85\times 10^{-12}\mathrm{F/m}$，$\mu_0 = 4\pi\times 10^{-7} = 1.26\times 10^{-6}\mathrm{H/m}$ は，それぞれ真空の誘電率と透磁率を表す．(3.3) と比較して，(3.4) の右辺が 0 なのは，電子に相当する磁気単極子が自然界に存在しない (少なくとも，これまでのところ確認されていない) という経験事実を反映している．このため (3.1) の右辺には，(3.2) の $\boldsymbol{j}$ に相当する磁化の流れの項が存在しない．

(3.4) をベクトル解析の公式 (付録 (A.26) 参照)

$$\mathrm{div\,rot}\,\boldsymbol{A} = 0 \tag{3.5}$$

と比較すると，$\boldsymbol{B}$ が

$$\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} \tag{3.6}$$

と書けることがわかる．$\boldsymbol{A}$ は**ベクトルポテンシャル**とよばれる．これを (3.1) に代入すると，

$$\mathrm{rot}\left(\boldsymbol{E} + \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\right) = 0.$$

これをベクトル解析の公式 (付録 (A.27) 参照)

$$\mathrm{rot}\,\mathrm{grad}\,\phi = 0 \tag{3.7}$$

と比較すると，$\boldsymbol{E}$ が

$$\boldsymbol{E} = -\mathrm{grad}\,\phi - \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{3.8}$$

のように書けることがわかる．ϕ は**スカラーポテンシャル**とよばれる．したがって，$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ は ϕ と $\boldsymbol{A}$ を与えれば決まる．ϕ と $\boldsymbol{A}$ は**電磁ポテンシャル**ともよばれる．

ϕ と $\boldsymbol{A}$ を決定する方程式は，(3.6) と (3.8) をマクスウェル方程式の残りの式 (3.2) と (3.3) に代入することで得られる．まず，(3.2) から

$$\frac{1}{\mu_0}\mathrm{rot}\ \mathrm{rot}\boldsymbol{A} = -\epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathrm{grad}\,\phi + \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t}\right) + \boldsymbol{j}.$$

ここで，付録 (A.28)

$$\mathrm{rot}\ \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = \mathrm{grad}\ \mathrm{div}\boldsymbol{A} - \Delta\boldsymbol{A}$$

を用いると，

$$\mathrm{grad}\ \mathrm{div}\boldsymbol{A} - \Delta\boldsymbol{A} + \epsilon_0\mu_0\left(\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\,\phi + \frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2}\right) = \mu_0\boldsymbol{j}.$$

$\epsilon_0\mu_0 = c^{-2}$ なので，

$$\mathrm{grad}\ \mathrm{div}\boldsymbol{A} - \Delta\boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\,\phi = \mu_0\boldsymbol{j}. \tag{3.9}$$

他方，(3.8) を (3.3) に代入すると，

$$-\epsilon_0\Delta\,\phi - \epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{div}\boldsymbol{A} = \rho. \tag{3.10}$$

(3.9) と (3.10) が $\boldsymbol{A}$ と ϕ を決める方程式である．$\boldsymbol{j}$ と ρ は独立ではなく，次の方程式を満たす．

$$\mathrm{div}\boldsymbol{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \tag{3.11}$$

これは，**連続の方程式**とよばれ，電荷の保存則を表している．(3.11) は (3.2), (3.3) を用いて次のように示される．

$$\mathrm{div}\boldsymbol{j} = \mathrm{div}\left(\frac{1}{\mu_0}\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B} - \epsilon_0\frac{\partial \boldsymbol{E}}{\partial t}\right) = -\frac{\partial}{\partial t}(\epsilon_0 \mathrm{div}\boldsymbol{E}) = -\frac{\partial \rho}{\partial t}.$$

問題 3.1　連続の方程式 (3.11) が電荷の保存則を意味していることを示せ.

【解答】 (3.11) を

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\mathrm{div}\,\boldsymbol{j}$$

と書いて，両辺をある有限の体積 V について積分して，ガウスの公式を適用すると，

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \rho\, d\boldsymbol{r} = -\int_V \mathrm{div}\,\boldsymbol{j}\, d\boldsymbol{r} = -\int_S \boldsymbol{j}\, d\boldsymbol{f}$$

が得られる．ここで，$d\boldsymbol{r}$ は体積要素，$d\boldsymbol{f}$ は V の表面 S に外向きに垂直な面積要素のベクトルである．この結果は体積 V に含まれる電荷の時間変化 (左辺) が，その領域に単位時間あたりに外部から流れ込む電流量 (右辺) に等しいことを意味している．これは，電荷の保存則に他ならない． ∎

問題 3.2　マクスウェル方程式 (3.1)–(3.4) は，6 個の変数 $\boldsymbol{E}, \boldsymbol{B}$ に対して，8 個の方程式を課しているようにみえる．これがなぜ矛盾しないかを考察せよ.

【ヒント】 (3.3) と (3.4) は，それぞれ (3.2) と (3.1) の初期条件になっている.

3.2　ゲージ不変性

電流密度 $\boldsymbol{j}$ と電荷密度 ρ を与えても，(3.9) と (3.10) だけからでは $\boldsymbol{A}$ と ϕ は一意には定まらない．実際，$\boldsymbol{A}_0$ と ϕ_0 が (3.9) と (3.10) の解とすると，χ を任意の関数として，

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 + \mathrm{grad}\,\chi, \qquad \phi = \phi_0 - \frac{\partial \chi}{\partial t} \tag{3.12}$$

も解となっている．(3.12) の変換を**ゲージ変換**という．(3.6) と (3.8) で与えられる $\boldsymbol{B}$ と $\boldsymbol{E}$ はゲージ変換に対して不変である.

問題 3.3　これを確かめよ.

ゲージ変換の自由度を利用すれば，電磁ポテンシャルを決定する方程式 (3.9), (3.10) を簡単化することができる．任意のベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r})$ に対して，**ゲージ関数** $\chi(\boldsymbol{r})$ を

$$\chi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi}\int \frac{\mathrm{div}\boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r}')}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\,d\boldsymbol{r}'$$

と選ぶ．公式

$$\Delta\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{3.13}$$

を用いると，

$$\Delta\chi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi}\int\left(\Delta\frac{1}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\right)\mathrm{div}\boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r}')\,d\boldsymbol{r}' = -\mathrm{div}\boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{r})$$

が成立することがわかる．このとき，ゲージ変換 (3.12) された $\boldsymbol{A}$ は，次の条件を満足する．

$$\mathrm{div}\boldsymbol{A} = \mathrm{div}\ \boldsymbol{A}_0 + \mathrm{div}\ \mathrm{grad}\ \chi = \mathrm{div}\boldsymbol{A}_0 + \Delta\chi = 0. \tag{3.14}$$

ベクトルポテンシャルが (3.14) を満足するゲージを**クーロン・ゲージ**とよぶ．

条件 (3.14) は $\boldsymbol{A}$ が横波であることを示している．実際，

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}(t)e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$$

とフーリエ展開すると，

$$\mathrm{div}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}i\boldsymbol{k}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}(t)e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} = 0.$$

これが任意の $\boldsymbol{r}$ に対して成立するためには，$\boldsymbol{k}\perp\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}}$ が成り立つ必要がある．したがって，ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ は，そのフーリエ成分が波数ベクトルに垂直な横波であることがわかる．同様に，(3.4) から $\boldsymbol{B}$ が横波であることがわかる．

(3.14) を (3.9) と (3.10) に代入すると，

$$-\Delta\boldsymbol{A} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\,\phi = \mu_0\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t), \tag{3.15}$$

$$-\epsilon_0\Delta\phi = \rho. \tag{3.16}$$

(3.16) は**ポアソン方程式**とよばれる．これは直ちに積分できて，

$$\phi(\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\int\frac{\rho(\boldsymbol{r}',t)}{|\,\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'\,|}\,d\boldsymbol{r}' \tag{3.17}$$

が得られる (証明は (3.13) を用いて行われる)．

(3.15) の解 $\boldsymbol{A}$ を求めるために次の事実に注目する．まず，左辺の第 1 項と第 2 項はクーロン・ゲージでは横波成分しかもたない．他方，第 3 項は縦波成

分だけを含む．これは，$\phi(\boldsymbol{r},t)$ をフーリエ変換することにより理解できる．すなわち，$\phi(\boldsymbol{r},t)$ をフーリエ変換した式

$$\phi(\boldsymbol{r},t)=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\phi_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}$$

に grad を作用させると，

$$\mathrm{grad}\,\phi=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}i\boldsymbol{k}\phi_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \tag{3.18}$$

となり，各フーリエ成分が $\boldsymbol{k}$ に比例していることから縦波であることがわかる．したがって，$\boldsymbol{j}$ を波数 $\boldsymbol{k}$ に平行な**縦波**成分 $\boldsymbol{j}_{\mathrm{L}}$ と垂直な**横波**成分 $\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}$ に分解し，前者を左辺の第 3 項に，後者を残りの項に等しいとおくことができる．すなわち，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)&=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k}}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\\&=\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left[\frac{(\boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{k})}{k^2}\boldsymbol{k}+\left(\boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k}}-\frac{(\boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{k})}{k^2}\boldsymbol{k}\right)\right]e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\\&=\boldsymbol{j}_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{r},t)+\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r},t).\end{aligned} \tag{3.19}$$

ここで，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{r},t)&\equiv\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{(\boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{k})}{k^2}\boldsymbol{k}e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}},\\\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r},t)&\equiv\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\left(\boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k}}-\frac{(\boldsymbol{j}_{\boldsymbol{k}}\cdot\boldsymbol{k})}{k^2}\boldsymbol{k}\right)e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}\end{aligned}$$

を定義すると，(3.15) を縦波成分

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{L}}(\boldsymbol{r},t)=\epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\,\phi(\boldsymbol{r},t) \tag{3.20}$$

と横波成分

$$-\Delta\boldsymbol{A}+\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2}=\mu_0\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r},t) \tag{3.21}$$

に分解することができる．(3.21) の解は，

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\frac{\mu_0}{4\pi}\int\frac{\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r}',t')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,d\boldsymbol{r}',\qquad t'=t-\frac{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}{c} \tag{3.22}$$

で与えられる．

問題 3.4　(3.22) が (3.21) の解になっていることを示せ．

【証明】 t' が $\boldsymbol{r}$ に依存していることに注意すると,

$$\Delta \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \frac{\mu_0}{4\pi}\int\left\{\left(\Delta\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}} + 2\left[\left(\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)\cdot\nabla\right]\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}} + \frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\Delta\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}\right\} d\boldsymbol{r}'.$$

右辺の第 1 項は (3.13) より $-\mu_0\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}(\boldsymbol{r},t)$ に等しい. 第 2 項と第 3 項は, それぞれ

$$\begin{aligned}
\text{第 2 項} &= \frac{\mu_0}{2\pi}\int\left[\left(\nabla\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)\cdot\nabla t'\right]\frac{\partial\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}}{\partial t'}\,d\boldsymbol{r}' \\
&= \frac{\mu_0}{2\pi c}\int\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}\frac{\partial\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}}{\partial t'}\,d\boldsymbol{r}', \\
\text{第 3 項} &= \frac{\mu_0}{4\pi}\int\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\nabla\left(\frac{\partial\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}}{\partial t'}\nabla t'\right)d\boldsymbol{r}' \\
&= -\frac{\mu_0}{4\pi c}\int\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\nabla\left(\frac{\partial\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}}{\partial t'}\frac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)d\boldsymbol{r}', \\
&= \frac{\mu_0}{4\pi c}\int\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial^2\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}}{\partial t'^2} - \frac{2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\frac{\partial\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}}{\partial t'}\right)d\boldsymbol{r}' \\
&= \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\boldsymbol{A}}{\partial t^2} - \frac{\mu_0}{2\pi c}\int\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2}\frac{\partial\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}}{\partial t'}\,d\boldsymbol{r}'.
\end{aligned}$$

ここで, $\nabla t' = -\dfrac{1}{c}\dfrac{\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$ などを使った. また, 最後の等式を得る際に (3.22) を使った. 第 3 項の最後の項は第 2 項と打ち消し合うので, (3.22) が (3.21) を満たしていることがわかる. ∎

電場も同様に, $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_{\mathrm{L}} + \boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}$ のように縦波成分 $\boldsymbol{E}_{\mathrm{L}}$ と横波成分 $\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}$ に分解すると, (3.8) で $\mathrm{grad}\,\phi$ が縦波 ((3.18) 参照), $\boldsymbol{A}$ が横波だから

$$\boldsymbol{E}_{\mathrm{L}} = -\mathrm{grad}\,\phi, \qquad \boldsymbol{E}_{\mathrm{T}} = -\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t} \tag{3.23}$$

であることがわかる. (3.20) と (3.23) より

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{L}} = \epsilon_0\frac{\partial}{\partial t}\mathrm{grad}\,\phi = -\epsilon_0\frac{\partial\boldsymbol{E}_{\mathrm{L}}}{\partial t}. \tag{3.24}$$

右辺は**変位電流**とよばれ, これが電流の縦波成分を与えている. ρ が与えられると (3.17) を通じて ϕ が求まり, $\boldsymbol{j}_{\mathrm{T}}$ から (3.22) を通じて $\boldsymbol{A}$ が求まる. $\boldsymbol{j}_{\mathrm{L}}$ に関する情報は, 連続の方程式から ρ に含まれているので不要である. 実際, (3.24) の両辺に div を作用させると, $\mathrm{div}\boldsymbol{j}_{\mathrm{L}} = \mathrm{div}\boldsymbol{j}$ および (3.16) から, (3.24) は連続の方程式 (3.11) に帰着する.

以上の結果をまとめると，クーロン・ゲージでは，電磁場の縦波成分 $\boldsymbol{E}_{\mathrm{L}}$ は電荷密度 ρ に関係し，スカラーポテンシャル ϕ で記述される．他方，横波成分 $\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{B}$ は電磁波に関係し，ベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ で表される．

3.3　アハラノフ-ボーム効果

電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}, \phi$ はゲージ変換の任意性をもっているために，古典電磁気学では電場と磁場がより基本的な物理量であり，電磁ポテンシャルはそれらを与える便宜的なものであると考えることができる．実際，粒子の運動を記述するニュートン方程式には，電場や磁場は現れるが，電磁ポテンシャルは直接には現れない．しかし，この事情は量子論においては一変する．電荷 q をもった荷電粒子の電磁場中の運動を記述する古典ハミルトニアンは，

$$H = \frac{1}{2m}(\boldsymbol{p} - q\boldsymbol{A})^2 + V(\boldsymbol{r}) + q\phi(\boldsymbol{r}, t) \tag{3.25}$$

で与えられる．量子化の手続きにより，対応するシュレーディンガー方程式は，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + q\phi(\boldsymbol{r}, t)\right]\Psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{3.26}$$

となる．このように，量子力学ではベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ が，通常のポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ と同様に，波動関数を決定する方程式に直接現れる．いま，与えられた電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}, \phi$ に対して，シュレーディンガー方程式 (3.26) の解 Ψ がわかっているとする．このとき，電磁ポテンシャルをゲージ変換

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 + \mathrm{grad}\,\chi, \qquad \phi = \phi_0 - \frac{\partial\chi}{\partial t} \tag{3.27}$$

しても，シュレーディンガー方程式 (3.26) の形が不変であるためには，波動関数を同時に次のように変換する必要がある．

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \Psi_0(\boldsymbol{r}, t)\exp\left(\frac{i}{\hbar}q\chi(\boldsymbol{r}, t)\right). \tag{3.28}$$

(3.28) は，波動関数の位相がゲージ関数 χ に依存していることを示している．

問題 3.5　シュレーディンガー方程式 (3.26) が，ゲージ変換 (3.27), (3.28) に対して不変である，すなわち，ゲージ変換された新しい電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}_0, \phi_0$ と波動関数 Ψ_0 が，(3.26) と同じ形のシュレーディンガー方程式を満足することを示せ．

電磁ポテンシャルが時間に陽に依存しない定常状態を考えよう．このとき，シュレーディンガー方程式は，

$$E\Psi(\boldsymbol{r}) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + q\phi(\boldsymbol{r})\right]\Psi(\boldsymbol{r}) \qquad (3.29)$$

と書ける．波動関数にユニタリー変換

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = \Psi_0(\boldsymbol{r})\exp\left(\frac{i}{\hbar}q\int^{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}\right) \qquad (3.30)$$

を施すと，(3.29) は，

$$E\Psi_0(\boldsymbol{r}) = \left[\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + q\phi(\boldsymbol{r})\right]\Psi_0(\boldsymbol{r})$$

となり，シュレーディンガー方程式 (3.29) からベクトルポテンシャルを消去することができる．このとき，波動関数は (3.30) のように，ベクトルポテンシャルに陽に依存する．アハラノフとボームは，この依存性が観測にかかる効果を導くことを示した．いま，図 3.1 のような 1 次元のリングを考え，リングの中心を磁束 Φ が貫いている状況を考えよう．磁束が存在する領域をリングの中心付近だけに局在させれば，リング上にある荷電粒子は磁束から直接力を受けることはない．

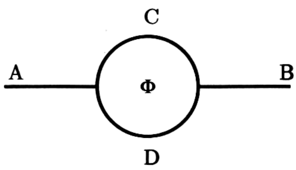


図 3.1 アハラノフ-ボーム効果

電流が 点 A から 点 B へ流れる状況を考えると，経路 ACB をたどった電子の 点 B での確率振幅 Ψ_1 は，

$$\Psi_1 = \Psi_0\exp\left(\frac{i}{\hbar}q\int_{\mathrm{ACB}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}\right) \qquad (3.31)$$

と書ける．同様に，経路 ADB をたどった電子の点 B での確率振幅は，

$$\Psi_2 = \Psi_0\exp\left(\frac{i}{\hbar}q\int_{\mathrm{ADB}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\,d\boldsymbol{x}\right) \qquad (3.32)$$

で与えられる．ここで，リングは $|\Psi_1| = |\Psi_2|$ となるように対称につくられているものとする．このとき，点 B において電子が見出される確率は次の量に比例する．

$$
\begin{aligned}
|\Psi_1 + \Psi_2|^2 &= |\Psi_0|^2 \left| \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int_{\mathrm{ACB}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}\right) + \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \int_{\mathrm{ADB}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}\right) \right|^2 \\
&= |\Psi_0|^2 \left| 1 + \exp\left(\frac{i}{\hbar} q \oint_{\text{リング}} \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\, d\boldsymbol{x}\right) \right|^2 \\
&= 2|\Psi_0|^2 \left(1 + \cos\left(\frac{q}{\hbar}\Phi\right)\right). \qquad (3.33)
\end{aligned}
$$

ここで，Φ はベクトルポテンシャルをリングに沿って 1 周線積分した量

$$
\Phi \equiv \oint_{\text{リング}} \boldsymbol{A}\, d\boldsymbol{x} \qquad (3.34)
$$

として定義される．ストークスの定理により Φ は，

$$
\Phi \equiv \oint_{\text{リング}} \boldsymbol{A}\, d\boldsymbol{x} = \int_{\text{リング}} \mathrm{rot}\boldsymbol{A}\, d\boldsymbol{S} = \int_{\text{リング}} \boldsymbol{B}\, d\boldsymbol{S} \qquad (3.35)
$$

のように磁場をリングの内側で面積分した量として書ける．ここで，$\oint_{\text{リング}} \cdots d\boldsymbol{x}$ はリングに沿った線積分，$\int_{\text{リング}} \cdots d\boldsymbol{S}$ はリングの内側の領域での面積分を表している．(3.35) から Φ はゲージ変換に対して不変な磁場の積分として表されるので，ゲージ不変な物理量であることがわかる．このように，ベクトルポテンシャルそれ自体はゲージ変換によって変化するが，リングに沿ったベクトルポテンシャルの線積分として定義される量はゲージ変換をしても値を変えず，観測結果に直接影響する．これを**アハラノフ-ボーム効果**という．特に，図 3.1 のような配置では，リングを貫く磁束 Φ を変化させると，AB 間のコンダクタンスは (3.33) のように振動する．

古典電磁気学では，荷電粒子は**ローレンツ力**

$$
\boldsymbol{F} = q(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \qquad (3.36)
$$

により電荷が存在するまさにその場所における電場と磁場から直接力を受ける．ところが，量子論では，たとえ電荷が運動する領域に電場や磁場が存在しなくても，波動関数が (3.30) のように影響を受ける．いま，一周の長さが L の 1 次元のリングを考え，リングの中心を磁束 Φ が貫いている状況を考えよ

う．磁束が存在する領域をリングの中心付近だけに局在させれば，リング上にある荷電粒子は磁束から直接力を受けることはないが，アハラノフ- ボーム効果によって，電荷はリングを一周すると位相が ϕ だけ変化する．

$$\Psi(x+L)=\Psi(x)e^{i\phi}, \qquad \phi=\frac{q}{\hbar}\oint \boldsymbol{A}\,d\boldsymbol{x}=\frac{q}{\hbar}\Phi. \tag{3.37}$$

波動関数の一価性より ϕ は 2π の整数倍 n でなければならない．したがって，

$$\frac{q}{\hbar}\Phi=2\pi n \longrightarrow \Phi=\frac{h}{q}n. \tag{3.38}$$

こうして，アハラノフ-ボーム効果の基本周期 h/q から，系を構成する最小電荷 q を知ることができる．q は，普通の金属では素電荷 e，超伝導体では $2e$ である．後者は，超伝導体中で電子 2 個がクーパー対とよばれる基本単位を構成していることを示している[1)]．

3.4 自由場の正準形式

自由場とは電荷が存在しない電磁場をいう．クーロン・ゲージでは，このとき $\phi=0$ であり，電流の縦成分 $\boldsymbol{j}_{\rm L}$ も 0 となる．(3.21) より $\boldsymbol{A}$ は方程式

$$\left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=0 \tag{3.39}$$

を満たす．これは，光子の質量が 0 であることを表している．実際，質量が m の粒子のエネルギー E と運動量 p の関係は，特殊相対性理論から

$$E^2=c^2p^2+m^2c^4$$

で与えられるので，これに量子化の手続き (1.7) を施すと，

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)A_\mu=\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2A_\mu \tag{3.40}$$

が得られる．これを (3.39) と比較すると $m=0$ であることがわかる．このように，ゲージ不変な場に対応する量子 (いまの場合は光子) の質量は 0 となる．

---

1) ヤンが指摘したように (C. N. Yang, Phys. Rev. D **1**, 2360 (1970))，異なった素粒子の電荷 q が互いに有理比でないとすると，アハラノフ-ボーム効果は周期的でなくなる．これは電磁場を記述するゲージ群がコンパクトでないことを意味する．ゲージ群がコンパクトであるためには，電荷が量子化されている必要がある．

ゲージ変換しても物理量は不変なので，ゲージは任意に選んでよく，クーロン・ゲージではそれを $\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}=0$ となるように選んだ．その結果，電磁場の自由度は横波の 2 成分のみとなる．物理的にはこれらの自由度は，偏光の自由度が 2 であることに対応している．

(3.39) の解は次のように与えられる．

$$\left.\begin{aligned}&\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\left[\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}+\boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right],\\&\omega_{\boldsymbol{k}}=c|\boldsymbol{k}|,\qquad \boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}=\boldsymbol{A}_{-\boldsymbol{k}\lambda}.\end{aligned}\right\}\tag{3.41}$$

ここで，λ は偏光の自由度を表している．

問題 3.6 (3.41) が (3.39) の解になっていることを確かめよ．

(3.41) から，電場と磁場は次のように求められる．

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r},t)=-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}=\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}i\omega_{\boldsymbol{k}}\left[\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}-\boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right],\tag{3.42}$$

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}=\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}i\boldsymbol{k}\times\left[\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}-\boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right].\tag{3.43}$$

電磁場の全エネルギー E は，

$$E=\frac{1}{4}\int\left(\epsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{H}^2\right)d\boldsymbol{r}=\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}2\epsilon_0V\omega_{\boldsymbol{k}}^2\boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}\tag{3.44}$$

と計算される．ここで，積分の前の因子が 1/2 でなく 1/4 となっているのは，フーリエ成分を複素数で扱っているためである．複素量 $\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ の実部と虚部を，それぞれ一般化された位置 $Q_{\boldsymbol{k}\lambda}$ と運動量 $P_{\boldsymbol{k}\lambda}$ とみなそう．

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}=\frac{1}{\sqrt{4\epsilon_0V\omega_{\boldsymbol{k}}^2}}\left(\omega_{\boldsymbol{k}}Q_{\boldsymbol{k}\lambda}+iP_{\boldsymbol{k}\lambda}\right)\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}.\tag{3.45}$$

ここで，偏光ベクトル $\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ は波数ベクトルが $\boldsymbol{k}$，偏光が λ の電磁場成分の偏光方向を表す単位ベクトルであり，λ の値が異なる偏光ベクトルは互いに直交する．(3.45) を (3.44) に代入すると，電磁場のエネルギーは，

$$E=\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\left(P_{\boldsymbol{k}\lambda}^2+\omega_{\boldsymbol{k}}^2Q_{\boldsymbol{k}\lambda}^2\right)\tag{3.46}$$

となり，調和振動子の集合体と数学的に等価であることがわかる．

3.5 電荷と磁束の不確定性関係

電磁場は，**試験電荷**に作用する力を通じて測定できる．ハイゼンベルクは，試験電荷の位置と運動量の間に不確定性関係 (1.100) が成立すると仮定すると，これによって測定される電場と磁場の間にも，同様な不確定性関係が成立しなければならないことを指摘した．このことを試験電荷として電子を用いた次の例で示そう．

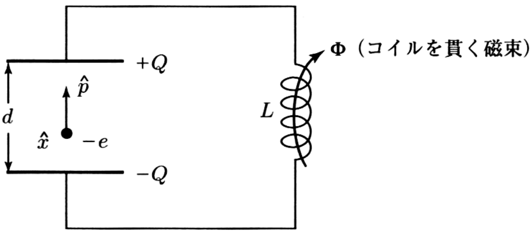


図 3.2 インダクタンス L のコイルにつながれた，d だけ離れた 2 つの電極間を運動する電子．Φ はコイルを貫く磁束，$\pm Q$ はコンデンサーの電極に帯電している電荷，$-e$ は電子の電荷，$\hat{x}, \hat{p}$ は電子の位置演算子と運動量演算子である．

インダクタンスが L のコイルとキャパシタンスが C のコンデンサーからなる LC 回路を考える (図 3.2)．図のように，電子が 2 つの金属板に垂直に運動している状況を考え，運動方向の電子の位置演算子と運動量演算子をそれぞれ $\hat{x}, \hat{p}$ とする．また，コンデンサーに蓄えられた電荷を Q，コイルを貫く磁束を Φ とする．電子は金属板間の電場 $E = V/d$ (d は 2 つの金属板の距離，V は電位差) によって加速されるので，方程式

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = e\frac{V}{d} = -\frac{e}{d}\frac{d\Phi}{dt}$$

が成立する．ここで，2 番目の等式を導く際に**ファラデーの電磁誘導の法則** $V = -d\Phi/dt$ を使った．これを積分すると，

$$\Phi = -\frac{d}{e}\hat{p} + \text{定数} \tag{3.47}$$

が得られる．他方，電子が $d\hat{x}$ だけ移動すると (端の効果が無視できるほど十分に広い) 金属板には $(-e/d)\,d\hat{x}$ なる**鏡像電荷**が誘起されるので，関係式

$$dQ = -\frac{e}{d}\,d\hat{x}$$

が成立し，これを積分することにより

$$Q = -\frac{e}{d}\hat{x} + 定数 \tag{3.48}$$

が得られる．(3.47) と (3.48) から，位置と運動量が演算子であると，それらと結合する電荷と磁束もまた演算子として振る舞うことがわかる．そこで，これらを $\hat{Q}, \hat{\Phi}$ と書くと，

$$[\hat{Q}, \hat{\Phi}] = [\hat{x}, \hat{p}] \tag{3.49}$$

が成立することがわかる．これに電子の位置と運動量の交換関係 $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ を代入すれば，$\hat{Q}$ と $\hat{\Phi}$ の間の交換関係

$$[\hat{Q}, \hat{\Phi}] = i\hbar \tag{3.50}$$

が得られる．

LC 回路のハミルトニアン $\hat{H}$ は，コイルに蓄えられた磁場のエネルギー $\hat{\Phi}^2/2L$ とキャパシタンスの静電エネルギー $\hat{Q}^2/2C$ の和で与えられる．

$$\hat{H} = \frac{\hat{\Phi}^2}{2L} + \frac{\hat{Q}^2}{2C}. \tag{3.51}$$

これは調和振動子のハミルトニアン (1.155) と同じなので，交換関係 (3.50) を課すことによって LC 回路は量子化され，固有エネルギーは，

$$E_n = \hbar\omega_{\mathrm{LC}}\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad \omega_{\mathrm{LC}} = (LC)^{-\frac{1}{2}} \tag{3.52}$$

で与えられる (1.11 節参照)．3.4 節で示されたように，電荷が存在しない自由な電磁場は調和振動子の集合体と等価なので，同様な手続きにより量子化される．

交換関係 (3.50) から，磁束と電荷は同時に決まった値をとることができず，不確定性関係

$$\Delta\Phi\Delta Q \geq \frac{\hbar}{2} \tag{3.53}$$

を満足することがわかる．LC 回路のコンデンサーに蓄えられた電荷 Q が，量子力学的にどれくらい揺らぐかを評価してみよう．量子化されたエネルギーの最小値は，零点エネルギー $\hbar\omega_{\mathrm{LC}}/2$ である．基底状態においては，電荷のエネルギーと磁場のエネルギーの期待値は等しいので，

$$\left\langle \frac{\hat{Q}^2}{2C} \right\rangle = \frac{\hbar\omega_{\mathrm{LC}}}{4}. \tag{3.54}$$

電荷の期待値を 0 とすると，これから電荷の揺らぎとして次の結果が得られる．

$$\Delta Q \equiv \sqrt{\langle \hat{Q}^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\hbar\omega_{\rm LC}C}{2}} = \frac{e}{2}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\rm LC}}{e^2/2C}}. \tag{3.55}$$

このように，量子化エネルギー $\hbar\omega_{\rm LC}$ と電子 1 個の静電エネルギー $e^2/2C$ の比が電荷の量子揺らぎの大きさを決める．

不確定性関係 (3.53) および電荷の揺らぎ (3.55) は，メゾスコピック領域において実際に観測結果に影響を与え，極微小なデバイスの動作性能に原理的な限界を与える要因となっている[2]．

3.6 第二量子化

古典電磁場は波動方程式に従うので，(波動方程式であるという意味で) シュレーディンガー方程式と数学的には同じレベルにあるとみなすこともできる．電磁場を量子化することは**第二量子化**とよばれる．電磁場の第二量子化は，一般化された位置と運動量が調和振動子と同じ交換関係を満足するように要請することでなされる．

$$\left[\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{P}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] = i\hbar\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}, \quad \left[\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{Q}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] = 0, \quad \left[\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{P}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] = 0. \tag{3.56}$$

ここで，$\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}$ は，$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}'$ のとき 1，$\boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{k}'$ のとき 0 をとるクロネッカーのデルタである ($\delta_{\lambda,\lambda'}$ も同様)．このとき，電磁場のエネルギーの表式 (3.46) は，第二量子化されたハミルトニアン

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\left(\hat{P}^2_{\boldsymbol{k}\lambda} + \omega^2_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{Q}^2_{\boldsymbol{k}\lambda}\right) \tag{3.57}$$

となる．

交換関係 (3.56) とハミルトニアン (3.57) で記述される量子化された電磁場の性質を理解するために，次のような演算子を導入しよう．

$$\begin{aligned} \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda} - i\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}\right), \\ \hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda} + i\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}\right). \end{aligned} \tag{3.58}$$

---

2) 単一電子デバイスの物理と動作限界については，例えば，上田正仁：応用物理 **62-9**, pp. 889-897 (1993); 日本物理学会誌 **49**, pp. 751-757 (1994).

ここで，$\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}$ と $\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ はそれぞれ**生成演算子**と**消滅演算子**とよばれ，次の交換関係を満足する．

$$\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}, \qquad \left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] = 0, \qquad \left[\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] = 0. \tag{3.59}$$

最初の交換関係は，次のようにして示すことができる．

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] \\
&\quad = \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}'}}}\left[\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda} + i\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda},\ \omega_{\boldsymbol{k}'}\hat{Q}_{\boldsymbol{k}'\lambda'} - i\hat{P}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] \\
&\quad = \frac{1}{2\hbar\sqrt{\omega_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}'}}}\Big\{\omega_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}'}\underbrace{\left[\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{Q}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right]}_{0} - i\omega_{\boldsymbol{k}}\underbrace{\left[\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{P}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right]}_{i\hbar\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}} \\
&\qquad\qquad + i\omega_{\boldsymbol{k}'}\underbrace{\left[\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{Q}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right]}_{-i\hbar\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}} - i^2\underbrace{\left[\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{P}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right]}_{0}\Big\} \\
&\quad = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}.
\end{aligned}$$

他の交換関係も同様に示すことができる．(3.58) を $\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda}$, $\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ について解くと，

$$\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\right), \qquad \hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda} = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} - \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\right). \tag{3.60}$$

これらを (3.57) に代入すると，

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} + \frac{1}{2}\right) \tag{3.61}$$

が得られる．このように，量子化された自由電磁場は，互いに独立な量子化された調和振動子の集合と等価であることがわかる．

電磁場を生成消滅演算子を使って表す操作は，**場の量子化**の例となっている．(3.45) の $\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ に (3.60) を代入したものを $\hat{\boldsymbol{A}}^{(+)}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ と書くと，

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{A}}^{(+)}_{\boldsymbol{k}\lambda} &= \frac{1}{\sqrt{4\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}^2 V}}\left(\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{Q}_{\boldsymbol{k}\lambda} + i\hat{P}_{\boldsymbol{k}\lambda}\right)\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda} \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}^2 V}}\left[\omega_{\boldsymbol{k}}\sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\boldsymbol{k}}}}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} + \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\right) + i(-i)\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2}}\left(\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} - \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\right)\right]\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda} \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}V}}\,\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}.
\end{aligned}$$

右辺の消滅演算子 $\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ の時間依存性は，ハイゼンベルク表示では (1.191) より $e^{-i\omega_{\boldsymbol{k}}t}$ で与えられる．これを正の振動数成分とよび，左辺のようにプラス符号

(+) をつけて表す．同様にして負の振動数成分は，

$$\boldsymbol{A}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} \to \hat{\boldsymbol{A}}^{(-)}_{\boldsymbol{k}\lambda} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}V}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda} \tag{3.62}$$

と量子化される．ここで，$\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ は波数 $\boldsymbol{k}$ をもったフーリエ成分の偏光ベクトルであり，$\boldsymbol{k}$ に垂直な 2 つの単位ベクトルの線形結合で表される．これらの置き換えを (3.41)–(3.43) に代入すると，次の結果が得られる．

$$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}V}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}\ e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)} + \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\ e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right], \tag{3.63}$$

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda} i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_0 V}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)} - \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right], \tag{3.64}$$

$$\hat{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda} i\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}V}}\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)} - \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right]. \tag{3.65}$$

右辺で $\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}$，$\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}$ は，電磁場の振幅が量子化されたもので，光の粒子性を表している．これは，$\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} = \hat{n}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ の固有値が離散的な値 $(0, 1, 2, \cdots)$ しかとらないからである．他方，$e^{\pm i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}$ は波動性を表している．このように，第二量子化すると，粒子性と波動性が同じ表式の中にあらわな形で表現されるという利点がある．

(3.64) で $\sqrt{\dfrac{\hbar\omega_0}{2\epsilon_0 V}}$ は 1 光子あたりの電場の大きさを，(3.65) では，

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}V}}k = \frac{1}{c}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_0 V}}$$

は 1 光子あたりの磁場の強さを表している．このように，1 光子あたりの電場や磁場の強さは，電磁場を微小な体積 V に閉じ込めることにより大きくすることができる．そのような**微小共振器**中では，第 5 章で述べられるように 1 光子といえども原子と強く相互作用をする．

3.7 光子数状態

電磁場のハミルトニアンは，(3.61) から，

$$\hat{H} = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\left(\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda} + \frac{1}{2}\right) \tag{3.66}$$

と書かれる．電磁場の状態は，波数 $\boldsymbol{k}$ と偏光 λ で指定される各モードに存在する光子数 $n_{\boldsymbol{k}\lambda}$ を与えることで決められる．そのような状態を $|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle$ と書

き，フォック状態または**光子数状態**とよばれる．この状態は，ハミルトニアン (3.66) の固有状態になっている．

$$\hat{H}|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \left(n_{\boldsymbol{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) |\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle. \tag{3.67}$$

このように，フォック状態はエネルギーが量子化されていることを直接的に表現しているが，我々が電場や磁場に対してもっている波としての古典的描像を表現することには適していない．実際，フォック状態 $|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle$ に対しては，電場や磁場の期待値は 0 となる．

$$\langle\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}|\hat{\boldsymbol{E}}|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle = 0, \tag{3.68}$$

$$\langle\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}|\hat{\boldsymbol{B}}|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle = 0. \tag{3.69}$$

しかし，これらは電場や磁場が存在しないことを意味するのではない．実際，電場と磁場の揺らぎを計算すると，

$$\langle\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}|\hat{\boldsymbol{E}}^2|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda} \frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{\epsilon_0 V} \left(n_{\boldsymbol{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right), \tag{3.70}$$

$$\langle\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}|\hat{\boldsymbol{B}}^2|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle = \sum_{\boldsymbol{k}\lambda} \frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\mu_0}{V} \left(n_{\boldsymbol{k}\lambda} + \frac{1}{2} \right) \tag{3.71}$$

のように 0 でない期待値が得られる．特に，光子が全く存在しない ($n_{\boldsymbol{k}\lambda} = 0$) 真空状態でも (3.70) と (3.71) は 0 にならず，電場や磁場が揺らいでいることがわかる．これを，電磁場の**真空場揺らぎ**という．真空場揺らぎは，原子の**自然放出**を引き起こすなどの実際に観測される効果をもたらす (第 5 章参照).

問題 3.7　(3.68)–(3.71) を確かめよ．

3.8　コヒーレント状態

日常的になじみの深い電場や磁場は，波として振る舞う．このような古典的な波 —電磁波— に最も近い量子状態は，**コヒーレント状態**である．

コヒーレント状態の性質

記述を簡単にするために，決まった波数 $\boldsymbol{k}$ と偏光 λ をもった電磁場モードを考え，その生成消滅演算子を添字 $\boldsymbol{k}, \lambda$ を省略して $\hat{a}^\dagger, \hat{a}$ と書こう．光のコヒーレント状態を定義するために，次のような**変位演算子**を導入する．

$$\hat{D}(\alpha) \equiv e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}. \tag{3.72}$$

変位演算子は，ユニタリー演算子

$$\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{D}(\alpha)^\dagger\hat{D}(\alpha) = \hat{1} \tag{3.73}$$

であり，消滅演算子 (生成演算子) を α (α^*) だけ平行移動する．

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) = \hat{a} + \alpha, \qquad \hat{D}(\alpha)\hat{a}\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{a} - \alpha, \tag{3.74}$$

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{D}(\alpha) = \hat{a}^\dagger + \alpha^*, \qquad \hat{D}(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{a}^\dagger - \alpha^*. \tag{3.75}$$

この証明は次のようになされる．α は複素数なので，α と α^* は独立変数とみなすことができる．(3.74) の左辺を α の関数とみなしてこれで微分すると，

$$\frac{\partial}{\partial\alpha}[\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha)] = \hat{D}^\dagger(\alpha)[\hat{a}, \hat{a}^\dagger]\hat{D}(\alpha) = \hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha) = \hat{1}.$$

この両辺を α について 0 から α まで積分すると，

$$\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha) - \hat{a} = \alpha$$

となり (3.74) の最初の等式が得られる．これに $\hat{D}(-\alpha) = \hat{D}^\dagger(\alpha)$ を代入すると，2 番目の等式が得られる．(3.75) も同様にして証明できる．

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は変位演算子を用いて，

$$|\alpha\rangle \equiv \hat{D}(\alpha)|0\rangle \tag{3.76}$$

と定義される．これは，真空状態を α だけ平行移動した状態がコヒーレント状態であると解釈できる．コヒーレント状態に消滅演算子を作用させると，

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha)\alpha\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \hat{D}(\alpha)(\hat{a} + \alpha)|0\rangle = \alpha\hat{D}(\alpha)|0\rangle = \alpha|\alpha\rangle.$$

すなわち，

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \tag{3.77}$$

が得られる．ここで，$\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{1}$ および $\hat{a}|0\rangle = 0$ を使った．このように，コヒーレント状態は消滅演算子の固有状態になっている．これは，コヒーレント状態では，光子を 1 個消滅させても量子状態が変化しないことを意味している．

任意の 2 つの演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ が交換関係 $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$, $[\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$ を満たすとき，**ベーカー–ハウスドルフの公式**とよばれる次の関係式が成立する．

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}e^{-\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}. \tag{3.78}$$

これを用いると，$\hat{D}(\alpha)$ は，

$$\hat{D}(\alpha) = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}e^{-\alpha^*\hat{a}} \tag{3.79}$$

と分解できるので，$e^{-\alpha^*\hat{a}}|0\rangle = |0\rangle$ に注意すると，$|\alpha\rangle$ は光子数状態を用いて次のように展開できる．

$$\begin{aligned}|\alpha\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}e^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{n!}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \\ &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle. \end{aligned}\tag{3.80}$$

コヒーレント状態の光子数を測定して n 個の光子が観測される確率分布 $P(n)$ は，**ポアソン分布**

$$P(n) = |\langle n|\alpha\rangle|^2 = e^{-\bar{n}}\frac{\bar{n}^n}{n!} \tag{3.81}$$

で与えられる．ここで，$\bar{n} \equiv |\alpha|^2$ は測定される光子数の期待値である．

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} nP(n).$$

ポアソン分布は個々の事象が互いに無相関に起こるときに現れる分布である．コヒーレント状態は位相がそろっている ((3.83) 参照) 反面，光子数分布はランダムであることがわかる．コヒーレント状態に対する光子数の 2 乗の期待値は，

$$\overline{n^2} = \sum_{n=0}^{\infty} n^2P(n) = \bar{n}^2 + \bar{n}$$

であり，分散は，

$$\langle(\Delta n)^2\rangle \equiv \overline{n^2} - \bar{n}^2 = \bar{n} \tag{3.82}$$

で与えられる．このように，コヒーレント状態では光子数の期待値と分散が等しい．

コヒーレント状態の振幅を $\alpha = |\alpha|e^{i\phi}$ のように振幅と位相に分けて書くと，(3.80) は，

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{P(n)}(e^{i\phi})^n|n\rangle \tag{3.83}$$

と書ける．右辺は，コヒーレント状態が，おのおのの光子数状態 $|n\rangle$ にポアソン分布に対応する振幅 $\sqrt{P(n)}$ と，光子 1 個あたり $e^{i\phi}$ という共通の位相因子

をつけて重ね合わせた状態であると解釈される．この状態に対する電場演算子と磁場演算子

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t)=i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_0 V}}\,\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\left[\hat{a}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}-\hat{a}^\dagger e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right], \tag{3.84}$$

$$\hat{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{r},t)=i\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}V}}\,\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\left[\hat{a}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}-\hat{a}^\dagger e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}\right] \tag{3.85}$$

の期待値をとると，

$$\langle\alpha|\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t)|\alpha\rangle=-\sqrt{\frac{2\hbar\omega}{\epsilon_0 V}}\,|\alpha|\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\sin(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t+\phi), \tag{3.86}$$

$$\langle\alpha|\hat{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{r},t)|\alpha\rangle=-\sqrt{\frac{2\hbar}{\epsilon_0\omega_{\boldsymbol{k}}V}}\,|\alpha|\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\sin(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t+\phi). \tag{3.87}$$

これらは，まさに正弦的に振動する古典的電場と磁場を表しており，ϕ はその位相因子となっている．

問題 3.8 (3.86) と (3.87) を確かめよ．

グラウバーの定理

コヒーレント状態は，エルミートでない消滅演算子の固有状態である ((3.77) 参照) ことからもわかるように，量子力学のオブザーバブルに対応する状態ではない．しかし，(3.86) や (3.87) からわかるように，古典電磁場はコヒーレント状態に対する量子力学的期待値に対応している．

グラウバーは，古典的な振動電流から発生する電磁波がコヒーレント状態であることを証明した[3)]．これを**グラウバーの定理**という．ここで，古典的電流とは電磁場を放射する際の反作用の影響が無視でき，時間の関数として一意に決まる電流を意味している．

電荷と電磁場との相互作用は，ハミルトニアン

$$\hat{H}_{\mathrm{I}}(t)=-\int\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)\cdot\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r},t)\,d\boldsymbol{r} \tag{3.88}$$

で表される．ここで，ベクトルポテンシャル $\hat{\boldsymbol{A}}$ は q-数であるが，電流密度 $\boldsymbol{j}$ は c-数である．状態ベクトルは，相互作用表示では，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle=\hat{H}_{\mathrm{I}}|\Psi(t)\rangle \tag{3.89}$$

3) R. J. Glauber, Phys. Rev. **131**, 2766 (1963).

に従って時間発展する．時刻 $t=0$ で電磁場が真空状態であると仮定すると，時刻 t における電磁場の状態は演算子の時間順序を無視すると，

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \hat{H}_{\mathrm{I}}(t')\,dt'\right)|0\rangle \tag{3.90}$$

と書ける．これに (3.63) を代入して，

$$\alpha_{\boldsymbol{k}\lambda}(t) \equiv -\frac{i}{\sqrt{2\epsilon_0\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}V}}\int d\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)} \tag{3.91}$$

とおくと，

$$|\Psi(t)\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}\lambda}\exp\bigl(\alpha_{\boldsymbol{k}\lambda}(t)\hat{a}^{\dagger}_{\boldsymbol{k}\lambda} - \alpha^*_{\boldsymbol{k}\lambda}(t)\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}\bigr)|0\rangle = \prod_{\boldsymbol{k}\lambda}|\alpha_{\boldsymbol{k}\lambda}(t)\rangle \tag{3.92}$$

となり，コヒーレント状態の直積状態が得られる．

この定理から，アンテナの電荷分布を振動させると，そこから発生する電磁波はコヒーレント状態であることがわかる．発振しきい値よりも十分高い電流で駆動されるレーザー光も，よい近似でコヒーレント状態であるとみなせる．この場合，レーザー媒質中に形成される分極がアンテナの役割を果たしていると考えられる．

3.9 スクイズド状態

生成消滅演算子の代わりに，それらの線形結合で定義されるエルミート演算子

$$\hat{a}_1 \equiv \frac{1}{2}(\hat{a}+\hat{a}^{\dagger}), \qquad \hat{a}_2 \equiv \frac{1}{2i}(\hat{a}-\hat{a}^{\dagger}) \tag{3.93}$$

を考える．電場演算子 (3.84) を $\hat{a}_1, \hat{a}_2$ を用いて表すと，

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t) = -2\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_0 V}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\bigl[\hat{a}_1\sin(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)+\hat{a}_2\cos(\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)\bigr] \tag{3.94}$$

となり，$\hat{a}_1, \hat{a}_2$ が，それぞれ電場の正弦成分と余弦成分の振幅に対応する演算子であることがわかる．これらは，正弦波と余弦波の位相が 90 度ずれていることから**直交位相振幅**とよばれる．

古典論では $\hat{a}_1$ と $\hat{a}_2$ は同時に正確な値をとることができる．しかし，量子論では，$\hat{a}_1$ と $\hat{a}_2$ の間には交換関係

$$[\hat{a}_1, \hat{a}_2] = \frac{i}{2} \tag{3.95}$$

が成立し，(1.131) より不確定性関係

$$\Delta a_1 \Delta a_2 \geq \frac{1}{4} \tag{3.96}$$

を満足しなければならない．したがって，一方の精度をよくすると他方のそれは悪くなる．

コヒーレント状態に対しては，

$$\langle\alpha|\hat{a}_1|\alpha\rangle = \frac{1}{2}(\alpha+\alpha^*), \qquad \langle\alpha|\hat{a}_1^2|\alpha\rangle = \frac{1}{4}\left((\alpha+\alpha^*)^2+1\right), \tag{3.97}$$

$$\langle\alpha|\hat{a}_2|\alpha\rangle = \frac{1}{2i}(\alpha-\alpha^*), \qquad \langle\alpha|\hat{a}_2^2|\alpha\rangle = \frac{1}{4}\left(-(\alpha-\alpha^*)^2+1\right) \tag{3.98}$$

となるので，

$$\Delta a_1 = \Delta a_2 = \frac{1}{2} \tag{3.99}$$

となり，2 つの直交位相振幅は同じ大きさの量子揺らぎをもっている．これらは，コヒーレント状態の直交位相振幅に情報をエンコードするうえでの原理的な限界を与えており，**標準量子限界**とよばれている．

不確定性関係を満足しつつ $\hat{a}_1$ と $\hat{a}_2$ の一方の精度を犠牲にして，他方の量子揺らぎを標準量子限界よりも小さくすることは可能である．そのような状態は，**直交位相振幅スクイズド状態**あるいは単に**スクイズド状態**とよばれる．(1.132) によれば，そのような状態 $|S\rangle$ は，演算子

$$\hat{b} = e^r\hat{a}_1 + ie^{-r}\hat{a}_2 = \hat{a}\cosh r + \hat{a}^\dagger \sinh r \qquad (r \text{ は実数}) \tag{3.100}$$

の固有状態

$$\hat{b}|S\rangle = \beta|S\rangle, \qquad \beta = \langle S|\hat{b}|S\rangle = \langle\hat{a}\rangle\cosh r + \langle\hat{a}^\dagger\rangle\sinh r \tag{3.101}$$

として与えられ，この状態に対する $\hat{a}_1$ と $\hat{a}_2$ の分散は，それぞれ

$$\Delta a_1 \equiv \sqrt{\langle(\Delta\hat{a}_1)^2\rangle} = \frac{1}{2}e^{-r}, \qquad \Delta a_2 \equiv \sqrt{\langle(\Delta\hat{a}_2)^2\rangle} = \frac{1}{2}e^{r} \tag{3.102}$$

となる．したがって，$r > 0$ ($r < 0$) のときは，$\hat{a}_1$ ($\hat{a}_2$) の揺らぎが標準量子限界よりも小さくなる．また，(3.102) は $\Delta a_1 \Delta a_2 = 1/4$ を満足するので，状態 $|S\rangle$ は最小不確定状態であることがわかる．

固有方程式 (3.101) を満足する状態 $|S\rangle$ を具体的に求めよう．そのために，まず，演算子 $\hat{b}$ が，ボソンの交換関係を満足することに着目する．実際，$\cosh r = \mu$，$\sinh r = \nu$ とおくと，(3.100) は，

$$\hat{b} = \mu\hat{a} + \nu\hat{a}^\dagger, \qquad [\hat{b}, \hat{b}^\dagger] = \mu^2 - \nu^2 = 1 \tag{3.103}$$

と書ける．(3.103) は，**ボゴリューボフ変換**とよばれている．(3.101) は (3.77) と形式的に全く同じで，求めたい固有状態 $|S\rangle$ が，ボソンの消滅演算子 $\hat{b}$ の固有状態，すなわち，コヒーレント状態であることを示している．したがって，$|S\rangle$ は (3.76) と同様に，演算子 $\hat{b}$ に対する変位演算子を用いて，

$$|S\rangle = e^{\beta\hat{b}^\dagger - \beta^*\hat{b}}|0\rangle_{\rm b} \tag{3.104}$$

と書けることがわかる．ここで，$|0\rangle_{\rm b}$ は生成消滅演算子が，それぞれ $\hat{b}^\dagger$ と $\hat{b}$ で与えられるボソンの真空状態であり，条件

$$\hat{b}|0\rangle_{\rm b} = (\mu\hat{a} + \nu\hat{a}^\dagger)|0\rangle_{\rm b} = 0 \tag{3.105}$$

を満足するものとして定義される．(3.104) の右辺の指数は，(3.103) および (3.101) を代入すると，

$$\beta\hat{b}^\dagger - \beta^*\hat{b} = \alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}, \qquad \alpha \equiv \beta\mu - \beta^*\nu = \langle S|\hat{a}|S\rangle \tag{3.106}$$

となるので，(3.104) は次のように書ける．

$$|S\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle_{\rm b}. \tag{3.107}$$

これは，スクイズド状態が $\hat{b}$ の真空状態を α だけ平行移動した状態であると解釈できる．交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ より $\hat{a} = d/d\hat{a}^\dagger$ と形式的に書けることに着目すると，(3.105) から

$$\left(\mu\frac{d}{d\hat{a}^\dagger} + \nu\hat{a}^\dagger\right)|0\rangle_{\rm b} = 0 \tag{3.108}$$

が成立する．視察により，(3.108) の解は，

$$|0\rangle_{\rm b} = Ne^{-\gamma\hat{a}^{\dagger 2}}|0\rangle, \qquad \gamma \equiv \frac{\nu}{2\mu} = \frac{1}{2}\tanh r \tag{3.109}$$

で与えられることがわかる．ここで，N は状態 $|0\rangle_{\rm b}$ が 1 に規格化されていることから決められる．右辺の指数を展開すると，

$$|0\rangle_{\rm b} = N\sum_{n=0}^{\infty}(-\gamma)^n\frac{\sqrt{(2n)!}}{n!}|2n\rangle. \tag{3.110}$$

$|0\rangle_{\rm b}$ のノルムが 1 であることを要請すると，

$${}_{\rm b}\langle 0|0\rangle_{\rm b} = N^2\sum_{n=0}^{\infty}\gamma^{2n}\frac{(2n)!}{(n!)^2} = \frac{N^2}{\sqrt{1-4\gamma^2}} = N^2\cosh r = 1$$

となり，規格化定数 N が，

$$N = \frac{1}{\sqrt{\cosh r}}$$

で与えられることがわかる．こうして，求めたいスクイズド状態は次のように与えられることがわかる．

$$\begin{aligned}
|S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\cosh r}}\hat{D}(\alpha)e^{-\gamma\hat{a}^{\dagger 2}}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{\cosh r}}e^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a}}e^{-\gamma\hat{a}^{\dagger 2}}|0\rangle, \\
\alpha &= \langle S|\hat{a}|S\rangle, \qquad \gamma = \frac{1}{2}\tanh r.
\end{aligned} \tag{3.111}$$

(3.75) を使うと $|S\rangle$ を次のように書くこともできる．

$$\begin{aligned}
|S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\cosh r}}\hat{D}(\alpha)e^{-\gamma\hat{a}^{\dagger 2}}\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{D}(\alpha)|0\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{\cosh r}}e^{-\gamma(\hat{a}^\dagger - \alpha^*)^2}|\alpha\rangle.
\end{aligned} \tag{3.112}$$

ここで，$|\alpha\rangle = \hat{D}(\alpha)|0\rangle$ はコヒーレント状態である．(3.111) や (3.112) の右辺の指数部分に $\hat{a}^{\dagger 2}$ という項が現れるが，これは直交位相振幅スクイズド状態が，2 光子を同時に放出する**非線形光学過程**によって生成されることを示している．

問題 3.9 スクイズド状態 (3.111) に対する光子数の期待値を求めよ．

【解答】 (3.107) より

$$\begin{aligned}
\langle S|\hat{n}|S\rangle &= {}_\mathrm{b}\langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{D}(\alpha)|0\rangle_\mathrm{b} \\
&= {}_\mathrm{b}\langle 0|\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}^\dagger\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha)\hat{a}\hat{D}(\alpha)|0\rangle_\mathrm{b} \\
&= {}_\mathrm{b}\langle 0|(\hat{a}^\dagger + \alpha^*)(\hat{a} + \alpha)|0\rangle_\mathrm{b}.
\end{aligned} \tag{3.113}$$

2 番目の等式で $\hat{D}(\alpha)\hat{D}^\dagger(\alpha) = \hat{1}$ を挿入し，3 番目の等式を得る際に (3.74) と (3.75) を用いた．(3.110) から $|0\rangle_\mathrm{b}$ が偶数個の光子しか含まないので，右辺の $\alpha\hat{a}^\dagger$ と $\alpha^*\hat{a}$ の期待値は消える．よって，求める期待値は，

$$\begin{aligned}
\langle S|\hat{n}|S\rangle &= |\alpha|^2 + N^2\sum_{n=0}^{\infty}\gamma^{2n}\frac{(2n)!}{(n!)^2}2n \\
&= |\alpha|^2 + N^2\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\sum_{n=0}^{\infty}\gamma^{2n}\frac{(2n)!}{(n!)^2} \\
&= |\alpha|^2 + N^2\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}N^{-2} \\
&= |\alpha|^2 + \frac{1}{2}\sinh^2 r
\end{aligned} \tag{3.114}$$

を得る． ∎

(3.114) から，直交位相振幅の量子揺らぎを小さくするために $|r|$ を大きくすると，平均光子数が増加することがわかる．したがって，量子揺らぎの小さなスクイズド状態を得るためには，平均光子数を大きくする必要がある．

ボコリューボフ変換は，スクイズド状態だけではなく，超伝導や超流動など物理のさまざまな分野に登場する重要な変換である．$\hat{b}$ はボソンの正準交換関係を満足しており，$\hat{b}^\dagger$ で生成される粒子はボース粒子として振る舞う．このような粒子は**準粒子**とよばれる．(3.103) からわかるように，$\hat{b}$ で記述される新しい粒子の消滅演算子は，$\hat{a}$ で記述されるもとの粒子の生成演算子と消滅演算子の線形結合で表されている．また，準粒子の真空状態 $|0\rangle_{\mathrm{b}}$ は粒子が存在しない状態ではなく，もとの粒子が (3.109) のようにペアーで生成されている状態である．これらから，ボゴリューボフ変換で記述される準粒子は，もとの粒子の集団的な振舞いを記述しているものと解釈できる．

3.10　位相演算子

位相は古典電磁場では自明なものとして存在するが，量子論ではどのように定義されるのだろうか．波数ベクトル，周波数，および偏光が決まった単一モードの電磁場を考えよう．ベクトルポテンシャルは，(3.63) より

$$\hat{A}(\boldsymbol{r},t)=\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega V}}\left[\hat{a}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega t)}+\hat{a}^\dagger e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega t)}\right] \tag{3.115}$$

で与えられる．対応する古典的な表式は，(3.41) より

$$A(\boldsymbol{r},t)=Ae^{i(\boldsymbol{kr}-\omega t)}+A^*e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega t)} \tag{3.116}$$

で与えられる．両者を比較すると，$\hbar$ を 0 に近づけながら $\hat{a}$ の期待値を大きくするという古典極限をとることにより，次の対応関係が成立することがわかる．

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2\epsilon_0\omega V}}\,\hat{a}\longrightarrow A\equiv|A|e^{i\phi}. \tag{3.117}$$

この対応から，量子力学的な位相演算子が導入できないだろうかという興味深い疑問が生じる．

古典電磁場は，(3.86), (3.87) のように位相 ϕ をもっている．ディラックは，古典的な位相に対応する**位相演算子**を，消滅演算子を形式的に振幅と位相に分

けることにより次のように導入した[4].

$$\hat{a} = e^{i\hat{\phi}}\sqrt{\hat{n}}. \tag{3.118}$$

この定義は古典電磁場とはよく対応している．実際，古典電磁場に最も近い量子状態であるコヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ に対する期待値をとると，

$$\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha = e^{i\phi}|\alpha| = e^{i\phi}\sqrt{\langle\hat{n}\rangle}$$

であり，(3.118) と形式的に同じ形に書ける．(3.118) のエルミート共役をとると，

$$\hat{a}^\dagger = \sqrt{\hat{n}}(e^{i\hat{\phi}})^\dagger \tag{3.119}$$

となる．もし，エルミートな位相演算子 $\hat{\phi}$ が存在するならば，$(e^{i\hat{\phi}})^\dagger = e^{-i\hat{\phi}}$ と書ける．さらに，位相演算子と数演算子 $\hat{n}$ の間に交換関係

$$[\hat{n}, \hat{\phi}] = i \tag{3.120}$$

を仮定すると，(3.118) と (3.119) より

$$\hat{a}\hat{a}^\dagger = e^{i\hat{\phi}}\hat{n}e^{-i\hat{\phi}}. \tag{3.121}$$

ここで，$\hat{f}(\alpha) \equiv e^{i\alpha\hat{\phi}}\hat{n}e^{-i\alpha\hat{\phi}}$ とおけば，(3.120) より

$$\hat{f}'(\alpha) = e^{i\alpha\hat{\phi}}i[\hat{\phi}, \hat{n}]e^{-i\alpha\hat{\phi}} = e^{i\alpha\hat{\phi}}e^{-i\alpha\hat{\phi}} = 1$$

となるので，両辺を α について積分すると，

$$\hat{f}(\alpha) = \hat{f}(0) + \alpha = \hat{n} + \alpha.$$

ここで，$\alpha = 1$ とおけば，正準交換関係 $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ が得られる．また，(3.120) に (1.130), (1.131) を当てはめると，光子数と位相の間の不確定性関係

$$\Delta n \Delta\phi \geq \frac{1}{2} \tag{3.122}$$

が導かれる．

以上の議論は，エルミートな位相演算子が存在することが前提とされている．しかし，(3.118) で定義されるようなエルミートな位相演算子は厳密には存在しない．これは，次のように示すことができる．(3.118) から $e^{i\hat{\phi}} = \hat{a}(\hat{n})^{-\frac{1}{2}}$ と書けるが，この右辺の左側から完全系 $\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$ を作用させて $\langle n|\hat{a} = \sqrt{n+1}\langle n+1|$ と $\langle n+1|(\hat{n})^{-\frac{1}{2}} = (n+1)^{-\frac{1}{2}}\langle n+1|$ を使うと，

4) P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. A **114**, 243 (1927).

$$e^{i\hat{\phi}} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|\hat{a}(\hat{n})^{-\frac{1}{2}} = \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1}|n\rangle\langle n+1|(\hat{n})^{-\frac{1}{2}}$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n+1| \qquad (3.123)$$

が得られる．他方，(3.119) より得られる $(e^{i\hat{\phi}})^\dagger = (\hat{n})^{-\frac{1}{2}}\hat{a}^\dagger$ の右辺の右側から完全系 $\hat{I} = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|$ を作用させると，

$$(e^{i\hat{\phi}})^\dagger = (\hat{n})^{-\frac{1}{2}}\hat{a}^\dagger \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = (\hat{n})^{-\frac{1}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \sqrt{n+1}|n+1\rangle\langle n|$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n| \qquad (3.124)$$

が得られる．(3.123), (3.124) より

$$e^{i\hat{\phi}}(e^{i\hat{\phi}})^\dagger = \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle\langle m+1| \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n| = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n| = \hat{I}, \qquad (3.125)$$

$$(e^{i\hat{\phi}})^\dagger e^{i\hat{\phi}} = \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n| \sum_{m=0}^{\infty} |m\rangle\langle m+1| = \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle\langle n+1|$$
$$= \hat{I} - |0\rangle\langle 0|, \qquad (3.126)$$

$$[e^{i\hat{\phi}}, (e^{i\hat{\phi}})^\dagger] = |0\rangle\langle 0| \qquad (3.127)$$

が得られる．$\hat{\phi}$ がエルミート演算子であるためには，$e^{i\hat{\phi}}(e^{i\hat{\phi}})^\dagger = (e^{i\hat{\phi}})^\dagger e^{i\hat{\phi}} = \hat{I}$ が成立しなければならないが，(3.126) の右辺に $|0\rangle\langle 0|$ なる項が存在するために，これが成立しないことがわかる．しかし，(3.126) と単位演算子 $\hat{I}$ との差が真空成分 $|0\rangle\langle 0|$ だけであるので，真空との重なり積分がほとんどない状態 (例えば，振幅が 1 に比べて十分大きなコヒーレント状態) に対しては事実上無視でき，$\hat{\phi}$ は近似的にエルミートとみなすことができる．この場合は，不確定性関係 (3.122) が成立するものと考えても実際上は差し支えない．しかし，真空との重なり積分が無視できないような，平均光子数が少ない状態に対しては (3.122) は成立しない．

観測可能な物理量 (オブザーバブル) に対応するエルミートな位相演算子が存在するかどうかという問題は，位相が古典電磁気学では自明な概念であるだけに多くの関心を集めてきた．サスキントとグロゴワーは，位相演算子は (3.118) のような意味では厳密には存在しないが，正弦，余弦に対応するエルミートな演算子が次のようにして定義できることを指摘した[5]．

5) L. Susskind and J. Glogower, Physics **1**, 49 (1964); P. Carruthers and M. M. Nieto, Rev. Mod. Phys. **40**, 411 (1968).

$$\hat{S} \equiv \frac{1}{2i}[e^{i\hat{\phi}} - (e^{i\hat{\phi}})^\dagger] = \frac{1}{2i}\sum_{n=0}^{\infty}(|n\rangle\langle n+1| - |n+1\rangle\langle n|), \tag{3.128}$$

$$\hat{C} \equiv \frac{1}{2}[e^{i\hat{\phi}} + (e^{i\hat{\phi}})^\dagger] = \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}(|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|). \tag{3.129}$$

正弦演算子 $\hat{S}$, **余弦演算子** $\hat{C}$ は，その定義式から明らかなようにエルミートであるが，簡単な計算から

$$\hat{C}^2 + \hat{S}^2 = \hat{I} - \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0| \tag{3.130}$$

となり，正弦関数，余弦関数から期待される関係式 $\cos^2\phi + \sin^2\phi = 1$ と比べて，やはり真空成分だけがずれている．他方，$\hat{S}, \hat{C}$，光子数演算子 $\hat{n}$ は，交換関係

$$[\hat{n}, \hat{S}] = i\hat{C}, \quad [\hat{n}, \hat{C}] = -i\hat{S}, \quad [\hat{S}, \hat{C}] = \frac{1}{2i}|0\rangle\langle 0| \tag{3.131}$$

を満足するので，次の不確定性関係は近似なしに成立する．

$$\Delta n \Delta S \geq \frac{1}{2}\langle\hat{C}\rangle, \quad \Delta n \Delta C \geq \frac{1}{2}\langle\hat{S}\rangle, \quad \Delta S \Delta C \geq \frac{1}{4}\langle|0\rangle\langle 0|\rangle. \tag{3.132}$$

問題 3.10 (3.130) と (3.131) が成立することを確かめよ．

【解答】 (3.128) と (3.129) の最後の式を使うと，

$$\hat{S}^2 = \frac{1}{4}\sum_{n=0}^{\infty}\big(|n\rangle\langle n| + |n+1\rangle\langle n+1| - |n\rangle\langle n+2| - |n+2\rangle\langle n|\big),$$

$$\hat{C}^2 = \frac{1}{4}\sum_{n=0}^{\infty}\big(|n\rangle\langle n| + |n+1\rangle\langle n+1| + |n\rangle\langle n+2| + |n+2\rangle\langle n|\big)$$

が得られる．したがって，

$$\begin{aligned}\hat{C}^2 + \hat{S}^2 &= \frac{1}{2}\sum_{n=0}^{\infty}\big(|n\rangle\langle n| + |n+1\rangle\langle n+1|\big)\\ &= \hat{I} - \frac{1}{2}|0\rangle\langle 0|\end{aligned}$$

が得られる．(3.131) も同様に示すことができる． ■

ペグとバーネットは，ヒルベルト空間を光子数が有限のところで切断して周期的境界条件を仮定すれば，エルミートな位相演算子が定義できることを指摘した[6]．いま，光子数が $s+1$ 個以上存在することはないものと仮定し，状態 $|s+1\rangle$ は $|0\rangle$ に等しいという周期的境界条件を仮定しよう．このとき，完全性条件および境界条件は，

6) D. T. Pegg and S. M. Barnett, Phys. Rev. A **39**, 1665 (1989).

$$\sum_{n=0}^{s} |n\rangle\langle n| = \hat{I}, \qquad |s+1\rangle = |0\rangle \tag{3.133}$$

と書ける．すると (3.123), (3.124) は，

$$e^{i\hat{\phi}} = \sum_{n=0}^{s} |n\rangle\langle n+1|, \qquad (e^{i\hat{\phi}})^\dagger = \sum_{n=0}^{s} |n+1\rangle\langle n| \tag{3.134}$$

と書ける．これらが，$\hat{\phi}$ がエルミートであるための条件 $e^{i\hat{\phi}}(e^{i\hat{\phi}})^\dagger = (e^{i\hat{\phi}})^\dagger e^{i\hat{\phi}} = \hat{I}$ を満足することは容易に示せる．また，$\hat{C}^2 + \hat{S}^2 = \hat{I}$ を満足することもわかる．このように，ヒルベルト空間を有限の光子数で切断することにより，エルミートな位相演算子を定義することができる．また，カットオフ光子数 s を十分に大きくとれば，ヒルベルト空間を有限の光子数で切断することは実際上問題がないように思われる．

しかし，このとき生成消滅演算子に対する正準交換関係が真空成分だけずれてしまう．実際，

$$\begin{aligned} \hat{a} &= e^{i\hat{\phi}}\sqrt{\hat{n}} = \sum_{n=0}^{s} \sqrt{n+1}|n\rangle\langle n+1|, \\ \hat{a}^\dagger &= \sqrt{\hat{n}}(e^{i\hat{\phi}})^\dagger = \sum_{n=0}^{s} \sqrt{n+1}|n+1\rangle\langle n| \end{aligned} \tag{3.135}$$

から

$$\begin{aligned} \hat{a}\hat{a}^\dagger &= \sum_{n=0}^{s} (n+1)|n\rangle\langle n|, \\ \hat{a}^\dagger\hat{a} &= \sum_{n=0}^{s} (n+1)|n+1\rangle\langle n+1| = \sum_{n=0}^{s} n|n\rangle\langle n| + (s+1)|0\rangle\langle 0| \end{aligned}$$

となり，

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I} - (s+1)|0\rangle\langle 0|$$

が導かれる．右辺のずれは，カットオフ s を大きくとるほど深刻になる．実は，正準交換関係 ($[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{I}$) が成立することを要求すると，エルミートな位相演算子が存在できないことが示される[7]．このように，位相という概念は，(3.117) の対応関係からも推測できるように，電磁場の振幅が大きく，真空状態との重なり積分が無視できるくらい光子数が多い極限で，漸近的に現れる近似的な概念である．

---

7) K. Fujikawa, Phys. Rev. A **52**, 3299 (1995).

4. 量子力学における干渉効果

4.1 二重スリットの実験

Each photon goes partly into each of the two slits, and then interferes only with itself. — P. A. M. Dirac

この有名なディラックの言葉は彼独特の印象的な表現ではあるが，光子という「実在」がスリットを通り抜けていると解釈してはならない．干渉するのは実在の波ではなく，系の情報を記述する確率振幅であると考えるべきである．

粒子がスクリーン上の点に至る経路が 2 通りある場合 (例えば二重スリットの実験) を考える．粒子がどちらの経路を通ったかを識別することが原理的に不可能な場合には，それぞれの経路を通る確率振幅は干渉しスクリーン上に干渉縞が現れる．実は，この条件さえ満足されれば，粒子が同じ源から発せられる必要性すらないのである．それゆえに，4.4 節で議論されるように，独立な 2 つのレーザー光を重ね合わせると干渉縞が現れる．

粒子がどちらの経路を通ったかが原理的に識別できない場合は，干渉縞が現れる．逆に，原理的に識別できる場合は，どちらの経路を通ったかを実際に観測するしないにかかわらず，干渉縞は現れない．不完全に識別できる場合は，識別できる度合いに応じて干渉縞は部分的に消滅する．

実際の実験状況では，2 つの経路が「原理的に」区別可能かどうかを明確に判断することは容易ではない．その理由は，光子が通過する「スリット」は，通常，巨視的な数の原子から構成されているため，それらがスリットを通過す

る光子に与える影響を完全に記述することが不可能だからである．このため，たとえ干渉縞が消滅したとしても，その原因を特定することは困難である．系がそれを取りまく**環境** (いまの場合はスリットを構成する原子) と相互作用する結果，干渉縞が消滅する場合もある．これを環境との相互作用による**デコヒーレンス**という．

このような疑問を払拭する究極のヤングの干渉実験として，イオンによる二重スリットの実験がなされた．図 4.1(a) のように，電場によって真空中に静止させられた 2 個の水銀イオン ($^{198}\mathrm{Hg}^{+}$) によって光を散乱させる．それぞれのイオンから散乱された光は干渉し，その干渉縞が検出器 D_2 で測定される．ここでは，イオンがスリットの役割を果たしており，イオンによる光の散乱はスリットによる光の回折に相当している．光の偏光は光子がスピン角運動量をもっていることの現れである．したがって，イオンが光子を吸収あるいは放出すると，イオンの磁気量子数が変化する．光子がどちらの「スリット」(イオン) により散乱されたかは，イオンの磁気量子数が変化したかどうかを調べることにより知ることができる．光子が通過した後にどちらかのイオンの磁気量子数が変化していれば，角運動量の保存則より散乱光の光子の偏光は入射光子のそれとは異なっており，光子はそのイオンによって散乱 (あるいは「観測」) されたといえる．しかし，どちらのイオンの磁気量子数も変化しなかった場合は，散乱光の光子の偏光は入射光子のそれと同じであり，光子がどちらのイオンに散乱されたかは原理的にわからない．実験結果は，入射光と同じ偏光の散乱光は干渉縞を示し (図 4.1(b))，入射光と垂直に偏光した散乱光は干渉縞を示さない (図 4.1(c))．その理由は，前者の場合は，角運動量の保存則よりイオンの磁気量子数は変化しておらず，光子がどちらのイオンに散乱されたかを原理的に知ることができないからである．また，後者の場合は，どちらかのイオンの磁気量子数が変化していなければならず，それを測定することにより光子がどちらのイオンに散乱されたかを知ることができるからである．

二重スリットの実験においては，「干渉縞」が波動性を表し，光子がどちらのスリットを通過するかという「二者択一性」が粒子性を表している．粒子性と波動性は量子という統一された概念の相補的な側面を表しており，一方が強く現れると他方は弱められる．これをボーアの**相補性原理**という．粒子性と波動性のどちらの側面が強く現れるかは，どの情報を原理的に読み出せるかという実験状況によって決まる．

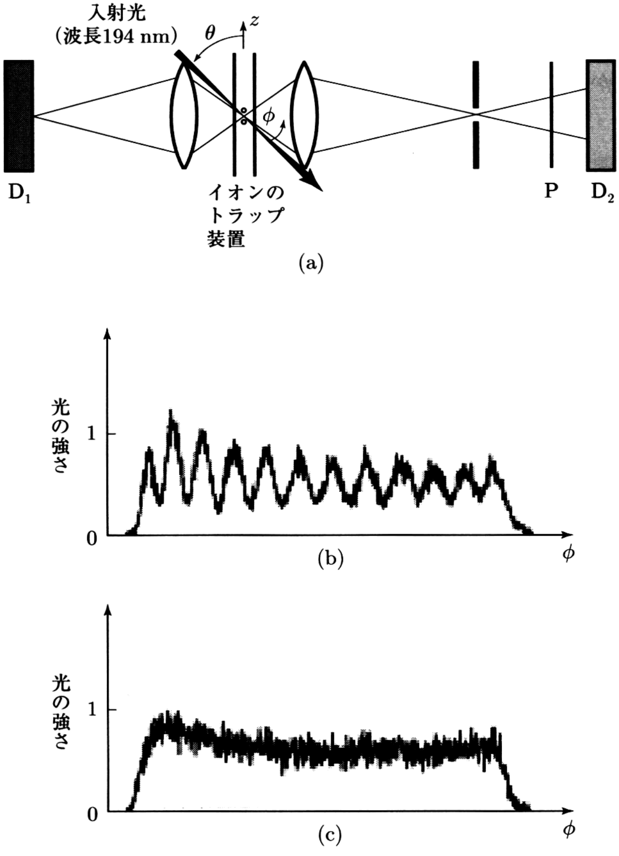


図 4.1 (a) 電場によって真空中にトラップされた 2 個の水銀イオンにより散乱された光の干渉実験の模式図．偏光した入射光はイオンにより散乱され，散乱光の角度依存性が検出器 D_2 で測定される (D_1 はトラップされたイオンの数をモニターする検出器)．検出器 D_2 の前に入射光と同じ偏光をもった光のみを通過させるフィルター P を置いた場合の測定結果が (b)，入射光と垂直な偏光の光のみを通過させるフィルターを置いた場合の測定結果が (c) である．［U. Eichmann, *et al.*, Phys. Rev. Lett. **70**, 2359 (1993) より転載］．

4.2 光の強度を表す演算子

干渉縞は光の強度の空間的・時間的変化として測定される．光の強度は古典論では電場の絶対値の 2 乗 $|\boldsymbol{E}|^2$ で与えられるが，量子論ではどのように表されるだろうか．これを調べるために，電場の演算子を次のように分解しよう．

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t) = \hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t) + \hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t). \tag{4.1}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t)$ と $\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)$ は，それぞれ電場の正と負の振動数成分を表す．すなわち，(3.64) より

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t) &= [\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)]^\dagger \\ &= \sum_{\boldsymbol{k},\lambda=1,2} i\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_0 V}}\,\boldsymbol{\varepsilon}_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega_{\boldsymbol{k}}t)}.\end{aligned} \tag{4.2}$$

ここで，$\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ は，波数 $\boldsymbol{k}$，偏光 λ の光子を 1 個消滅する演算子であり，次の交換関係を満足する．

$$\left.\begin{aligned}\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] &= \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}, \\ \left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] &= 0, \\ \left[\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'\lambda'}\right] &= 0.\end{aligned}\right\} \tag{4.3}$$

電磁場の状態は，各モードの光子数が決まっているフォック状態

$$|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle \equiv |n_{\boldsymbol{k}_1\lambda_1}, n_{\boldsymbol{k}_2\lambda_2}, \cdots\rangle \tag{4.4}$$

で展開できる．生成，消滅演算子が作用すると，フォック状態は次のように変化する ((1.170), (1.171), (1.167) 参照)．

$$\left.\begin{aligned}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}|n_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{\boldsymbol{k}\lambda}}|n_{\boldsymbol{k}\lambda}-1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}|n_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle &= \sqrt{n_{\boldsymbol{k}\lambda}+1}|n_{\boldsymbol{k}\lambda}+1\rangle, \\ \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}|n_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle &= n_{\boldsymbol{k}\lambda}|n_{\boldsymbol{k}\lambda}\rangle.\end{aligned}\right\} \tag{4.5}$$

最後の関係式は，**数演算子** $\hat{n}_{\boldsymbol{k}\lambda} = \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}\lambda}\hat{a}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ が，波数 $\boldsymbol{k}$，偏光 λ をもった光子の個数の測定 (すなわち**フォトンカウンティング**すること) に対応することを示している．数演算子は，生成演算子を消滅演算子の左側におく順序となっており，これを，**ノーマルオーダー**という．光の強度は，量子論では単位時間あたりに測定される光子の数に比例するので，光の強度に対応する演算子は，電場演算

子をノーマルオーダーに並べた $\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}$ で与えられる．したがって，フォック状態に対する光の強度は，

$$\begin{aligned}\text{光の強度} &\propto \langle\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}|\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t)|\{n_{\boldsymbol{k}\lambda}\}\rangle \\ &= \sum_{\boldsymbol{k},\lambda=1,2}\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_0 V}n_{\boldsymbol{k}\lambda}\end{aligned} \tag{4.6}$$

で与えられることがわかる ($\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}/2\epsilon_0 V$ が光子 1 個あたりの電場強度であることを思い出そう)．量子論では，測定する量に対応する演算子はしばしば非自明であり，実際の測定に対応する演算子を注意深く決めないと物理的に不合理な結果に導かれる (問題 4.1 参照)．

問題 4.1　(4.6) でノーマルオーダーをとらずに，単に電場演算子の 2 乗をとると，$\langle\{n_{\boldsymbol{k}}\}|\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t)|\{n_{\boldsymbol{k}}\}\rangle$ は無限大になることを確かめよ．

【解答】

$$\begin{aligned}&\langle\{n_{\boldsymbol{k}}\}|\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t)|\{n_{\boldsymbol{k}}\}\rangle \\ &= \langle\{n_{\boldsymbol{k}}\}|(\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t))^2 + (\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t))^2 + \hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t) \\ &\quad + \hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t)|\{n_{\boldsymbol{k}}\}\rangle \\ &= \langle\{n_{\boldsymbol{k}}\}|2\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t) + [\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r},t),\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r},t)]|\{n_{\boldsymbol{k}}\}\rangle \\ &= \sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{\epsilon_0 V}n_{\boldsymbol{k}\lambda} + \sum_{\boldsymbol{k}}\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\epsilon_0 V}\end{aligned}$$

となり，右辺の最後の項が無限大となる．■

4.3　第二量子化形式による 1 粒子干渉の理論

本章の冒頭で紹介した，「1 個の光子が自分自身と干渉する」というディラックの言葉を数学的に表現してみよう．以下の議論では，光子の偏光は 1 つに固定されているものと仮定して，偏光方向を示す添字 λ は省略する．図 4.2 のスクリーン上の点 $\boldsymbol{r}$ における第二量子化された電場演算子は，スリット 1, 2 を通過した電場の重ね合わせとして書ける．

$$\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)} = \hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}e^{i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1}\boldsymbol{u}_1 + \hat{a}_{\boldsymbol{k}_2}e^{i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2}\boldsymbol{u}_2 \tag{4.7}$$

ここで，$\boldsymbol{u}_1$, $\boldsymbol{u}_2$ は，スリットの幾何学的形状などに依存する因子である．**1 光子状態**は次のように書ける．

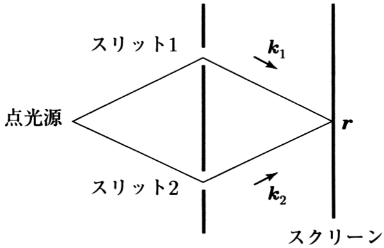


図 4.2 ヤングの干渉実験の模式図

$$|1\text{ 光子 }\rangle = \cos\theta|1,0\rangle + \sin\theta|0,1\rangle. \tag{4.8}$$

ここで，$|1,0\rangle$, $|0,1\rangle$ は，それぞれ光子がスリット 1, 2 を通過する状態ベクトルを表している．これらの状態ベクトルは，1 に規格化されているものとする．すなわち，

$$\langle 1,0|1,0\rangle = 1, \qquad \langle 0,1|0,1\rangle = 1. \tag{4.9}$$

しかし，光子がスリット 1 を通過する事象とスリット 2 を通過する事象は互いに排他的なので，$|1,0\rangle$ と $|0,1\rangle$ は直交しなければならない．

$$\langle 1,0|0,1\rangle = \langle 0,1|1,0\rangle = 0. \tag{4.10}$$

これらから，(4.8) の 1 光子状態は，1 に規格化されていることがわかる．

$$\langle 1\text{ 光子 }|1\text{ 光子 }\rangle = \cos^2\theta + \sin^2\theta = 1. \tag{4.11}$$

さて，(4.6) より，スクリーン上の位置 $\boldsymbol{r}$ で光子が検出される確率 $P(\boldsymbol{r})$ は，次の量に比例する．

$$P(\boldsymbol{r}) \propto \langle 1\text{ 光子 }|\hat{\boldsymbol{E}}^{(-)}(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r})|1\text{ 光子 }\rangle. \tag{4.12}$$

ここで，

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{E}}^{(+)}(\boldsymbol{r})|1\text{ 光子 }\rangle &= (\hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}e^{i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1}\boldsymbol{u}_1 + \hat{a}_{\boldsymbol{k}_2}e^{i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2}\boldsymbol{u}_2)(\cos\theta|1,0\rangle + \sin\theta|0,1\rangle) \\ &= (e^{i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1}\boldsymbol{u}_1\cos\theta + e^{i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2}\boldsymbol{u}_2\sin\theta)|0,0\rangle\end{aligned}$$

なので，

$$P(\boldsymbol{r}) \propto |e^{i\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1}\boldsymbol{u}_1\cos\theta + e^{i\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2}\boldsymbol{u}_2\sin\theta|^2$$

$$= |\boldsymbol{u}_1|^2 \cos^2\theta + |\boldsymbol{u}_2|^2 \sin^2\theta + 2\mathrm{Re}[\boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{u}_2^* e^{i(\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2)}] \sin\theta\cos\theta$$
$$= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2}\cos(\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2 + \phi). \tag{4.13}$$

ここで，Re[A] は A の実部を表す．また，$I_1 \equiv |\boldsymbol{u}_1|^2\cos^2\theta$, $I_2 \equiv |\boldsymbol{u}_2|^2\sin^2\theta$ は，片方のスリットを閉じた場合の電場強度の分布であり，ϕ は $\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_2^* = |\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_2^*|e^{i\phi}$ で定義される位相である．(4.13) は，古典論の結果と一致する．したがって，「光子が自分自身と干渉する」という 1 光子干渉は，量子論と古典論の計算結果に差はない．

干渉縞が現れる度合いを表す量として，次に定義される**干渉縞の明暗比**とよばれる量 ν がしばしば用いられる．

$$\nu \equiv \frac{I_{\mathrm{max}} - I_{\mathrm{min}}}{I_{\mathrm{max}} + I_{\mathrm{min}}}. \tag{4.14}$$

ここで，I_{max} と I_{min} は，それぞれ干渉縞の山と谷の位置における電場強度である．これに (4.13) から得られる I_{max}, I_{min} を代入すれば，

$$\nu = \frac{I_{\mathrm{max}} - I_{\mathrm{min}}}{I_{\mathrm{max}} + I_{\mathrm{min}}} = \frac{2\sqrt{I_1 I_2}}{I_1 + I_2} \leq 1 \tag{4.15}$$

が得られる．

4.4　独立な光源からの光の干渉

次に，2 つの独立な光源から発せられた光が干渉するための条件を考察しよう (図 4.3)．光源 A, B からスクリーンへ達する光子の消滅演算子をそれぞれ $\hat{a}_{\mathrm{A}}$,

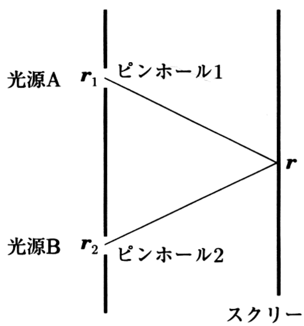


図 4.3　2 つの独立な光源からの光の干渉

$\hat{a}_{\mathrm{B}}$ と書くと，スクリーン上の点 $\boldsymbol{r}$ における電場演算子の正の振動数成分は，

$$\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \hat{a}_{\mathrm{A}} e^{i\boldsymbol{k}_{\mathrm{A}}\boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}} + \hat{a}_{\mathrm{B}} e^{i\boldsymbol{k}_{\mathrm{B}}\boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}} \tag{4.16}$$

と書ける．ここで，$\boldsymbol{r}_{\mathrm{A}} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_2$ である．また，式を簡単にするために，ピンホールの幾何学的形状などの因子は省略した．光源の状態ベクトルを

$$|\phi\rangle_{\mathrm{A}} |\psi\rangle_{\mathrm{B}} \tag{4.17}$$

と書くと，2 つの光源 A と B が独立であることは，状態 $|\phi\rangle_{\mathrm{A}}$ と $|\psi\rangle_{\mathrm{B}}$ が直交することによって表現される．

$${}_{\mathrm{A}}\langle\phi|\psi\rangle_{\mathrm{B}} = {}_{\mathrm{B}}\langle\psi|\phi\rangle_{\mathrm{A}} = 0. \tag{4.18}$$

また，各状態ベクトルは，1 に規格化されているものと仮定する．

$${}_{\mathrm{A}}\langle\phi|\phi\rangle_{\mathrm{A}} = {}_{\mathrm{B}}\langle\psi|\psi\rangle_{\mathrm{B}} = 1. \tag{4.19}$$

スクリーン上の位置 $\boldsymbol{r}$ で光子が検出される確率は，ノーマルオーダーされた光の強度演算子の期待値

$$\begin{aligned}
&\langle \hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}) \hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}) \rangle \\
&\quad = {}_{\mathrm{A}}\langle\phi|\hat{a}_{\mathrm{A}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathrm{A}}|\phi\rangle_{\mathrm{A}} + {}_{\mathrm{B}}\langle\psi|\hat{a}_{\mathrm{B}}^{\dagger}\hat{a}_{\mathrm{B}}|\psi\rangle_{\mathrm{B}} \\
&\qquad + (e^{-i(\boldsymbol{k}_{\mathrm{A}}\boldsymbol{r}_{\mathrm{A}} - \boldsymbol{k}_{\mathrm{B}}\boldsymbol{r}_{\mathrm{B}})} {}_{\mathrm{A}}\langle\phi|\hat{a}_{\mathrm{A}}^{\dagger}|\phi\rangle_{\mathrm{A}}\ {}_{\mathrm{B}}\langle\psi|\hat{a}_{\mathrm{B}}|\psi\rangle_{\mathrm{B}} + \mathrm{c.c.})
\end{aligned} \tag{4.20}$$

に比例する．ここで，右辺の第 3 項とその複素共役な第 4 項 (c.c. で記した) が干渉効果を表している．これから，2 つの独立な光源からの光が干渉するためには，

$${}_{\mathrm{A}}\langle\phi|\hat{a}_{\mathrm{A}}^{\dagger}|\phi\rangle_{\mathrm{A}} \neq 0 \quad \text{かつ} \quad {}_{\mathrm{B}}\langle\psi|\hat{a}_{\mathrm{B}}|\psi\rangle_{\mathrm{B}} \neq 0 \tag{4.21}$$

であることが必要十分である．これは，どちらの光源の光子数も揺らいでいなければならないことを意味している．実際に，もし，光源 A からの光子数が揺らがない光子数状態 $|n\rangle$ であるとすると，

$$\langle n|\hat{a}_{\mathrm{A}}^{\dagger}|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle = 0 \tag{4.22}$$

となり干渉縞は現れない．この実験例として，単一原子からの蛍光を光源 A として用い，光源 B として位相が安定化されたレーザー光を用いる場合を考え

よう．この場合，蛍光の強さが最大となる点では干渉が起こらないことが知られている．これは，蛍光の強さが最大になる時点で光子 1 個が原子から確実に放出されており，上記の (4.22) の場合があてはまるからである．

独立な光源からの干渉実験を説明するために，不確定性関係を使った次のような議論がなされることがある．λ を光の波長とし，θ を 2 つの光源がスクリーン上の任意の点を見込む角度であるとすると，その点付近の干渉縞の間隔は λ/θ で与えられる．干渉縞が識別できるためには，検出器の位置の精度 Δx が干渉縞の間隔 λ/θ よりも高い必要がある．すなわち，

$$\Delta x < \frac{\lambda}{\theta}. \tag{4.23}$$

このとき，不確定性関係より検出器の運動量の不確定性 Δp_x は，不等式

$$|\Delta p_x| \geq \frac{h}{\Delta x} > \frac{h}{\lambda}\theta \tag{4.24}$$

を満足しなければならない．光源 A, B から来た光子は x 方向の運動量が違うだけなので，光子がどちらから来たかを知るためには，検出器の運動量の精度 Δp_x が，

$$|(p_{\mathrm{A}})_x - (p_{\mathrm{B}})_x| = \left|\frac{h}{\lambda}\sin\frac{\theta}{2} - \frac{h}{\lambda}\sin\left(-\frac{\theta}{2}\right)\right| \simeq \frac{h}{\lambda}\theta \tag{4.25}$$

よりも高い必要がある．すなわち，

$$\Delta p_x < \frac{h}{\lambda}\theta. \tag{4.26}$$

しかし，この条件は (4.24) と矛盾する．したがって，干渉縞を観測しようとしてスクリーン上で検出される光子の位置を λ/θ 以上の精度で測定すると，測定された光子が A, B どちらの光源から来たかがいえなくなる．しかし，上の反例 (4.22) が示しているように，光子がどちらの光源から来るかが原理的に言えないということは，干渉縞が現れるための必要条件であるが十分条件ではない．

独立な 2 つの光源からの光が干渉することは，マンデルらによって実証された[1)]．2 つのレーザーの強度を減光フィルターで十分に弱め，光源からスクリーンまでの間に光子が 2 個以上存在しないような状況でも，干渉縞が現れることを実証する実験が同じグループによってなされた[2)]．これは，次のように理解

---

1) G. Magyar and L. Mandel, Nature (London) **198**, 255 (1963); M. S. Lipset and L. Mandel, Nature (London) **199**, 553 (1963).

2) R. L. Pfleegor and L. Mandel, J. Opt. Soc. Am. **58**, 946 (1968).

することができる．レーザー光をコヒーレント状態で近似すると，光の状態ベクトルは，

$$|\alpha\rangle_{\mathrm{A}}|\beta\rangle_{\mathrm{B}} \tag{4.27}$$

で与えられる．ここで，α, β はコヒーレント状態の振幅である．コヒーレント状態が消滅演算子の固有状態であること ((3.77) 参照) を思い出すと，状態 (4.27) に対する (4.20) の期待値は次のように書ける．

$$\langle \hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r})\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r})\rangle$$
$$= |\alpha|^2 + |\beta|^2 + 2|\alpha||\beta|\cos(\boldsymbol{k}_{\mathrm{A}}\boldsymbol{r}_{\mathrm{A}} - \boldsymbol{k}_{\mathrm{B}}\boldsymbol{r}_{\mathrm{B}} + \theta_\alpha - \theta_\beta). \tag{4.28}$$

ここで，$\alpha = |\alpha|e^{i\theta_\alpha}$, $\beta = |\beta|e^{i\theta_\beta}$ である．このように，レーザー光の振幅がどんなに小さくても干渉縞は現れる．

4.5 自発的対称性の破れ

2 つのレーザー光の干渉現象を完全に理解するためには，もう少し深い考察が必要である．現実のレーザー光の位相は，自然放出のために時間的にゆっくりと揺らいでいる．したがって，(4.28) が成立するためには，位相が揺らぐ時間スケールに比べて観測時間は十分短くなければならない．それよりも長い時間データを蓄積すると，(4.28) の位相差 $\theta_\alpha - \theta_\beta$ がランダムに変化する結果，干渉縞は図 4.3 のスクリーン上で時間とともに上下に移動し，長時間平均すると消えてしまう．それゆえ，長時間平均が量子力学的アンサンブル平均に等しいと仮定すると，量子力学的期待値としては (4.28) の右辺の干渉項は消えてしまう．それでは，実験で観測される (時間的にゆっくりと上下に移動する) 干渉縞は何を意味しているのだろうか．厳密に言うと，実験で観測される干渉縞は (4.20) のような電場の 2 次の相関で記述される干渉効果 (これを **1 次干渉**とよぼう) ではなく，

$$\langle \hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}_1,t)\hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}_2,t)\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t)\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)\rangle \tag{4.29}$$

という電場の 4 次の相関で記述される効果 (**2 次干渉**) である (詳しくは 4.7 節を参照)．実際，干渉縞が現れる位置は時間的に上下に変動するが縞全体が一緒に移動するので，(4.29) を縞のある山と別の山の位置の差 $|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|$ の関数としてみると時間的に変化しない．2 つの独立なレーザー光の干渉実験では，

我々は干渉縞の個別の山の絶対位置ではなく，山が規則的に並んでいるという相対的な位置関係から干渉縞を認識しているのである．これに対して，ヤングの干渉実験では，山の位置そのものも時間的に変動しない．

電磁場の位相は時間的に揺らぎ，長時間でみると 0 から 2π まで一様に分布する．また，絶対位相が存在しないことから，観測にかかる物理量はすべて位相の差に依存しなければならない．実際，(4.28) の例でも，干渉縞は θ_α と θ_β の差 $\theta_\alpha - \theta_\beta$ に依存しているので，おのおのの位相を同じ値ずつずらしても観測結果には影響しない．

位相差 $\theta_\alpha - \theta_\beta$ が時間的にゆっくりと変化するということを別にすれば，コヒーレント状態と 1 次干渉による記述 (4.28) が，2 つの独立なレーザー光の干渉という本質的には 2 次の干渉現象をよく再現していることは事実である．これは，ひとたびレーザー発振が起きると電場に長時間の相関

$$g^{(1)}(\tau) = \langle \hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}, \tau)\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}, 0)\rangle \tag{4.30}$$

が生じるからである．この相関関数が 0 でない値を保つ時間を**コヒーレンス時間** τ_c というが，レーザー発振が起こると τ_c は非常に長くなる．特に，τ_c が観測時間よりもはるかに長い極限では，2 つのレーザー光の位相の値があたかも，それぞれ θ_α と θ_β に決まっているかのようにみなして，いろいろな物理量を計算しても事実上問題が生じない．レーザー光では長時間 τ にわたり (4.30) の相関関数の値が一定に保たれるのは，レーザー光が光子の**ボース–アインシュタイン凝縮**であるからである．第 6 章で述べるように，ひとたびボース–アインシュタイン凝縮が起こると，位相が長距離あるいは長時間にわたって一定に保たれる．その結果，位相が 0 から 2π まで一様に分布するという系が本来もっている**対称性が自発的に破れ**，(有限の時間でみると) 位相がある値に定まっているようにみえる．しかし現実には，位相は非常にゆっくりとではあるが変化し，十分長い時間が経過すると，位相が 0 から 2π まで一様に分布しているという系が本来もっている対称性が回復される．このように，自発的に破れた対称性を回復させるモード (自由度) を**ゴールドストーン・モード**という．レーザー光の場合は，自然放出過程が位相を揺らがせ対称性を回復する役割を果たしている．

4.6 量子情報の消去とコヒーレンスの回復

ある種の非線形結晶からは，反対方向の運動量をもった光子が 2 個同時に放出される．図 4.4 のように光源の右側にスリット 1, 2 があいている板を置き，その右側のスクリーン B はそれらを通った光子のみが到達できるようにする．スリットを光子が通過する事象のみを考えると，光源から発生する光子の状態は次のように書ける．

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1_{\boldsymbol{k}_1}, 1_{-\boldsymbol{k}_1}\rangle + |1_{\boldsymbol{k}_2}, 1_{-\boldsymbol{k}_2}\rangle). \tag{4.31}$$

ここで，$|1_{\boldsymbol{k}_i}, 1_{-\boldsymbol{k}_i}\rangle$ $(i = 1, 2)$ は，波数が $\boldsymbol{k}_i$ と $-\boldsymbol{k}_i$ の**光子対**の状態を表している．このような状況下で次の問題を考える．

- スクリーン B 上に干渉縞は現れるか？
- スクリーン B に比べて，スクリーン A をより光源の近くに置き，A 上で光子を観測する場合，スクリーン B 上に干渉縞は現れるか？
- 逆にスクリーン A に比べて，スクリーン B をより光源の近くに置き，B 上で光子を観測する場合，経路の途中に二重スリットをもたないスクリーン A 上で干渉縞は現れるか？

まず，最初の問題を考える．スクリーン B 上の点 $\boldsymbol{r}$ に到達する光子の消滅演算子 $\hat{B}(\boldsymbol{r})$ は，スリット 1, 2 を通過した光子の消滅演算子 $\hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}_2}$ の線形結合

$$\hat{B}(\boldsymbol{r}) = \alpha(\boldsymbol{r})\hat{a}_{\boldsymbol{k}_1} + \beta(\boldsymbol{r})\hat{a}_{\boldsymbol{k}_2} \tag{4.32}$$

で書ける．ここで，$\alpha(\boldsymbol{r}), \beta(\boldsymbol{r})$ はスクリーン上の位置 $\boldsymbol{r}$ に依存する係数である

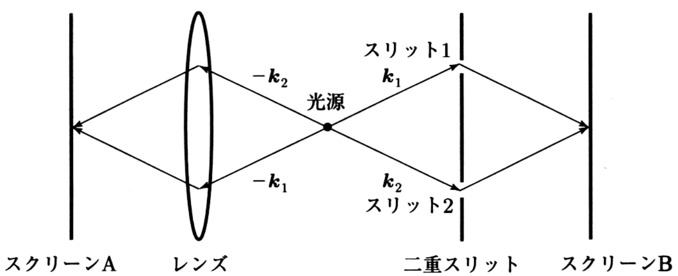


図 4.4 量子情報の消去と干渉縞の回復の実験の概念図

が, $\hat{B}$ が正準交換関係 $[\hat{B}, \hat{B}^\dagger] = 1$ を満たすという条件から, 関係式 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ を満足しなければならない. スクリーン B 上の位置 $\boldsymbol{r}$ で光子を検出する確率は次の量に比例する.

$$\langle\Psi|\hat{B}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{B}(\boldsymbol{r})|\Psi\rangle. \tag{4.33}$$

ところが, これに状態 (4.31) を代入すると,

$$\langle\Psi|\hat{B}^\dagger(\boldsymbol{r})\hat{B}(\boldsymbol{r})|\Psi\rangle = \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2) = \frac{1}{2} \tag{4.34}$$

となるので, 干渉縞は現れないことがわかる. 光子がどちらのスリットを通過したのかを観測していないにもかかわらず干渉縞が現れないのは, スクリーン A 側に放出された光子の運動量が $-\boldsymbol{k}_1$ と $-\boldsymbol{k}_2$ のいずれであるかを測定することにより, B 側に放出された光子がどちらのスリットを通過したのかを知ることができるからである. これは, 次のような定理として一般化することができる.

定理 2 つの直交する状態 $|\varphi\rangle$, $|\chi\rangle$ と 2 つの状態 $|w_1\rangle$, $|w_2\rangle$ が, **もつれた状態**

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\varphi\rangle|w_1\rangle + |\chi\rangle|w_2\rangle) \tag{4.35}$$

にある場合, $|w_1\rangle$ と $|w_2\rangle$ は干渉しない.

2 番目の問題に答えるために, スクリーン A 上の位置 $\boldsymbol{r}$ における光子の消滅演算子 $\hat{A}(\boldsymbol{r})$ を導入しよう. これが, 波数 $-\boldsymbol{k}_1$ と $-\boldsymbol{k}_2$ の光子の消滅演算子の線形結合

$$\hat{A}(\boldsymbol{r}) = \gamma(\boldsymbol{r})\hat{a}_{-\boldsymbol{k}_1} + \delta(\boldsymbol{r})\hat{a}_{-\boldsymbol{k}_2} \tag{4.36}$$

で書けるような状況を考えよう. スクリーン A 上の位置 $\boldsymbol{r}_\mathrm{A}$ で光子が検出された直後の状態ベクトルは, (4.31) に (4.36) を作用させることにより

$$|\Psi_A\rangle \propto \hat{A}(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\gamma(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})|1_{\boldsymbol{k}_1}\rangle + \delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})|1_{\boldsymbol{k}_2}\rangle) \tag{4.37}$$

に比例することがわかる. このとき, スクリーン B 上の位置 $\boldsymbol{r}_\mathrm{B}$ で光子を検出する確率は次の量に比例する.

$$\langle\Psi_A|\hat{B}^\dagger(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\hat{B}(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})|\Psi_A\rangle. \tag{4.38}$$

これに (4.37) と (4.32) を代入すると,

$$\langle\Psi_A|\hat{B}^\dagger(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\hat{B}(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})|\Psi_A\rangle \propto |\alpha(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\gamma(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})+\beta(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})|^2 \tag{4.39}$$

となり，右辺を展開すると干渉項 $\mathrm{Re}(\alpha^*(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\gamma^*(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})\beta(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{A}))$ が現れることがわかる[3]．干渉縞が現れる理由は，スクリーン A 上で光子を測定すると (4.37) に示されているように，状態のもつれが解消されるからである．このように，量子状態に関する情報を観測その他の方法で消去することにより，干渉縞を回復させることが可能である．これを**量子消去**という．

3 番目の問題に関しては，(4.37)–(4.39) においてスクリーン A と B の順序を入れ替えることにより，スクリーン A 上に干渉縞が現れることがわかる．これらは最近，インスブルック大学のグループにより実証された[4]．

問題 4.2 (4.39) を示せ．

【**解答**】 (4.37) と (4.32) より

$$\begin{aligned}\hat{B}(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})|\Psi_A\rangle &\propto \big(\alpha(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}+\beta(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\hat{a}_{\boldsymbol{k}_2}\big)\big(\gamma(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})|1_{\boldsymbol{k}_1}\rangle+\delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})|1_{\boldsymbol{k}_2}\rangle\big)\\ &= \big(\alpha(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\gamma(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})+\beta(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})\big)|\mathrm{vac}\rangle.\end{aligned}$$

ここで，$|\mathrm{vac}\rangle$ は真空である．

$$\begin{aligned}\therefore\quad \langle\Psi_A|\hat{B}^\dagger(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\hat{B}(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})|\Psi_A\rangle &= \|\hat{B}(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})|\Psi_A\rangle\|^2\\ &\propto |\alpha(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\gamma(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})+\beta(\boldsymbol{r}_\mathrm{B})\delta(\boldsymbol{r}_\mathrm{A})|^2.\end{aligned}$$

■

4.7 2 粒子干渉

4.7.1 空間的非局所相関

干渉するのは 1 粒子だけとは限らない．このことを理解するために，2 光子の干渉の問題を考えよう．1 粒子の干渉現象は量子論と古典論で同じ結果となるが，2 粒子以上の干渉現象は**量子統計**の効果により量子論と古典論で差が生じる．図 4.5 のように 2 つの光源 A, B からやって来る光子をスクリーン上の 2

---

3) スクリーン B 上に現れる干渉パターン (4.39) が，スクリーン A 上で観測された光子の位置 $\boldsymbol{r}_\mathrm{A}$ に依存することに注意しよう．実際には，$\boldsymbol{r}_\mathrm{A}$ は各瞬間ごとにランダムに揺らぐので，(4.39) を $\boldsymbol{r}_\mathrm{A}$ について平均すると干渉パターンは消えてしまう．これは，B 上で観測される光子をただ積算するだけでは干渉縞は現れないことを意味する．$\boldsymbol{r}_\mathrm{A}$ の値ごとに B 上で観測される光子を積算してはじめて，(4.39) の干渉パターンが現れる．このことが，B から A へ光速よりも速い通信ができないことを保証している (その理由を考えてみよ)．

4) A. Zeilinger, Rev. Mod. Phys. **71**, S288 (1999).

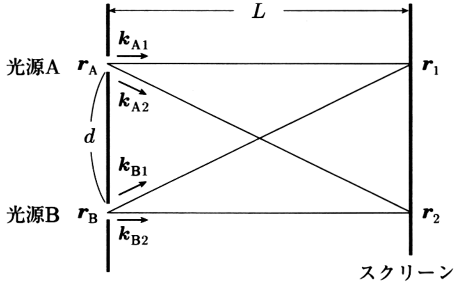


図 4.5　2 光子干渉実験の模式図

点 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ で同時に検出する確率を考えよう．スクリーン上の点の電場 (の正の振動数成分) は，次のように光源 A, B からの電場の重ね合わせとして表され，

$$\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_1) = \hat{E}_{\rm A}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm A1}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\rm A})} + \hat{E}_{\rm B}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm B1}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\rm B})}, \tag{4.40}$$

$$\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_2) = \hat{E}_{\rm A}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm A2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\rm A})} + \hat{E}_{\rm B}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm B2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\rm B})} \tag{4.41}$$

と書ける．スクリーン上の位置 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ で，それぞれ光子を 1 個ずつ検出する同時計測確率 $P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は，古典的には各点での電場強度の積 $|E(\boldsymbol{r}_1)|^2|E(\boldsymbol{r}_2)|^2$ に比例する．量子論では，4.2 節で述べたように，電場演算子の積をノーマルオーダーに並べて，

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = c\langle \hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}_1)\hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}_2)\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_2)\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_1)\rangle \tag{4.42}$$

と書ける．ここで，c は定数である．右辺に (4.40) と (4.41) を代入すると，

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = c\langle & (\hat{E}_{\rm A}^{(-)} e^{-i\boldsymbol{k}_{\rm A1}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\rm A})} + \hat{E}_{\rm B}^{(-)} e^{-i\boldsymbol{k}_{\rm B1}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\rm B})}) \\ & \times (\hat{E}_{\rm A}^{(-)} e^{-i\boldsymbol{k}_{\rm A2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\rm A})} + \hat{E}_{\rm B}^{(-)} e^{-i\boldsymbol{k}_{\rm B2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\rm B})}) \\ & \times (\hat{E}_{\rm A}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm A2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\rm A})} + \hat{E}_{\rm B}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm B2}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\rm B})}) \\ & \times (\hat{E}_{\rm A}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm A1}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\rm A})} + \hat{E}_{\rm B}^{(+)} e^{i\boldsymbol{k}_{\rm B1}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\rm B})})\rangle. \end{aligned} \tag{4.43}$$

ここで，光の状態として光源 A と B から 1 光子ずつやって来る 2 光子状態 $|1\rangle_{\rm A}|1\rangle_{\rm B}$ をとる．このとき上式の期待値として残るのは次の項のみとなる．

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = 2c\langle \hat{E}_{\rm A}^{(-)} \hat{E}_{\rm B}^{(-)} \hat{E}_{\rm A}^{(+)} \hat{E}_{\rm B}^{(+)}\rangle(1 + \cos\phi). \tag{4.44}$$

ここで，

$$\begin{aligned}\phi &= \boldsymbol{k}_{\mathrm{A1}}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}) + \boldsymbol{k}_{\mathrm{B2}}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}) - \boldsymbol{k}_{\mathrm{A2}}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}) - \boldsymbol{k}_{\mathrm{B1}}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}) \\ &\simeq \frac{kd}{L}(x_2 - x_1) \end{aligned} \tag{4.45}$$

であり，k は光の波数，x_1, x_2 はそれぞれ $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$ のスクリーン方向の座標成分，$d \equiv |\boldsymbol{r}_{\mathrm{A}} - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}|$，$L$ はスリットとスクリーンの距離である．

問題 4.3 (4.44), (4.45) を示せ．

【解答】 状態 $|1\rangle_{\mathrm{A}}|1\rangle_{\mathrm{B}}$ に対する (4.43) の期待値で消えないで残る項が，$\hat{E}_{\mathrm{A}}^{(-)}\hat{E}_{\mathrm{B}}^{(-)}\hat{E}_{\mathrm{A}}^{(+)}\hat{E}_{\mathrm{B}}^{(+)}$ の組み合わせのみであることに着目して，該当する項を取り出すと，(4.44) と (4.45) の ϕ の最初の等式が得られる．波数の絶対値の大きさが等しい ($|\boldsymbol{k}_{\mathrm{A1}}| = |\boldsymbol{k}_{\mathrm{A2}}| = |\boldsymbol{k}_{\mathrm{B1}}| = |\boldsymbol{k}_{\mathrm{B2}}| \equiv k$) ことに注意すると，

$$\phi = k(|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}| + |\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}| - |\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}| - |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}|).$$

ここで，図 4.5 の紙面上のスクリーンに平行方向に x 軸をとり，光源 B を座標の原点にとる $\boldsymbol{r}_{\mathrm{B}} = \mathbf{0}$ と，

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}| &= \sqrt{L^2 + (x_1 - d)^2} \simeq L + \frac{(x_1 - d)^2}{2L}, \\ |\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}}| &\simeq L + \frac{(x_2 - d)^2}{2L}, \\ |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}| &= \sqrt{L^2 + x_1^2} \simeq L + \frac{x_1^2}{2L}, \\ |\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}}| &\simeq L + \frac{x_2^2}{2L}\end{aligned}$$

が得られる．ここで，$L \gg |x_1 - d|$ などを仮定した．これらを上の ϕ の式に代入すると，(4.45) の 2 番目の表式が得られる． ∎

(4.44) から，(4.14) で定義された干渉縞の明暗比は，光源の強度にかかわらず 100%であることがわかる．これが純粋に量子力学的効果であることを理解するために，古典光学で計算するとどうなるか考えてみよう．古典光学では，$\hat{E}^{(+)}$ は古典的電場の正の周波数成分 V で置き換えられる．

$$\begin{aligned} V_1 &= V_{\mathrm{A}} e^{i\boldsymbol{k}_{\mathrm{A1}}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}})} + V_{\mathrm{B}} e^{i\boldsymbol{k}_{\mathrm{B1}}(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}})}, \\ V_2 &= V_{\mathrm{A}} e^{i\boldsymbol{k}_{\mathrm{A2}}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{A}})} + V_{\mathrm{B}} e^{i\boldsymbol{k}_{\mathrm{B1}}(\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_{\mathrm{B}})}. \end{aligned} \tag{4.46}$$

光源 A, B からの光がランダムな位相をもつものと仮定すると，

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) &= c\langle |V_1|^2 |V_2|^2 \rangle \\ &= c\left[\langle (I_{\mathrm{A}} + I_{\mathrm{B}})^2 \rangle + 2\langle I_{\mathrm{A}} I_{\mathrm{B}} \rangle \cos\phi\right]. \end{aligned} \tag{4.47}$$

ここで，$I_A = |V_A|^2$，$I_B = |V_B|^2$ である．これから明暗比は，

$$\nu = \frac{I_{\max} - I_{\min}}{I_{\max} + I_{\min}} = \frac{2\langle I_A I_B\rangle}{\langle (I_A + I_B)^2\rangle} \le \frac{1}{2} \tag{4.48}$$

となり，古典光学での明暗比は，光源の強度に依存し最大でも 50%であることがわかる．

(4.45) を (4.44) に代入し，スクリーン上で干渉縞が変化する方向だけを考え，それを x 軸にとると，

$$P(x_1, x_2) = A\left(1 + \cos\frac{kd}{L}(x_1 - x_2)\right). \tag{4.49}$$

ここで，$A = 2c\langle \hat{E}_A^{(-)}\hat{E}_B^{(-)}\hat{E}_A^{(+)}\hat{E}_B^{(+)}\rangle$ である．(4.49) から，光子がスクリーン上のある点 x_2 で検出されると，条件

$$\frac{kd}{L}(x_1 - x_2) = \pi(2n+1) \longrightarrow x_1 = x_2 + \frac{\pi L}{kd}(2n+1) \quad (n \text{ は整数}) \tag{4.50}$$

を満たす他の点 x_1 で光子が同時刻に検出される確率は 0 になる．このような**非局所相関**は，2 光子の

確率振幅 (光源 A からの光子が $\boldsymbol{r}_1$ で検出され，かつ光源 B からの光子が $\boldsymbol{r}_2$ で検出される) と

確率振幅 (光源 A からの光子が $\boldsymbol{r}_2$ で検出され，かつ光源 B からの光子が $\boldsymbol{r}_1$ で検出される)

が干渉した結果生じたことが (4.49) の導出過程から理解できる．

古典光学の場合は，同時計測確率は，

$$P(x_1, x_2) = A\left(1 + \nu\cos\frac{2\pi}{L}(x_1 - x_2)\right) \qquad \left(\nu \le \frac{1}{2}\right) \tag{4.51}$$

で与えられるが，$\nu \le 1/2$ なので，ある点 x_1 で光子を検出した場合に別な点で光子を検出する確率を 0 にすることはできない．このように，完全な非局所相関は，2 粒子の確率振幅が干渉する量子論に特有のものであるといえる．オウとマンデルは，**パラメトリック蛍光**とよばれる光子対を発生させる光源を使って $P(x_1, x_2)$ を測定し，$\nu > 1/2$ であることを実証した[5)]．これは，パラメトリック蛍光によって発生する光子対が，古典論では説明できない空間的な非局所相関をもつことを実証している．

---

5)　Z. Y. Ou and L. Mandel, Phys. Rev. Lett. **62**, 2941 (1989).

4.7.2 時間的非局所相関

図 4.6 のように，原子から放出された 2 個の光子が別々に検出される状況を考えよう[6]．図で L_1, L_2 は光をコリメートするレンズ，F_1, F_2 はそれぞれ波長 λ_1, λ_2 の光子のみを通過させるフィルター，M_i, M_i' $(i=1,2)$ は，光ビームを半分に分ける半透鏡を表している．これにより，左右に進む 2 つの光子はそれぞれ短い行路 S_1, S_2 と長い行路 L_1, L_2 に分けられ，それらがビームスプリッターで再び重ね合わさって検出器 D_i, D_i' $(i=1,2)$ で測定される．長い経路と短い経路の光路差は左右で同じにしてあり，光路差を光速で割った時間を ΔT と書く．ϕ_i は長い経路を通った光の位相を ϕ_i だけずらす操置である．検出器 D_1 における電場演算子の正の振動子成分は，

$$\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)=\frac{1}{2}\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)+\frac{1}{2}e^{i\phi_1}\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t-\Delta T) \tag{4.52}$$

で与えられる．ここで，電磁場の偏光は 1 つに決まっているものと仮定している．同様にして，検出器 D_2 における電場演算子の正の振動子成分は，

$$\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t)=\frac{1}{2}\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t)+\frac{1}{2}e^{i\phi_2}\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t-\Delta T) \tag{4.53}$$

で与えられる．したがって，検出器 D_1 と D_2 で光子が同時に検出されるレート R_c は次の量に比例する．

$$R_c=\langle\hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}_1,t)\hat{E}^{(-)}(\boldsymbol{r}_2,t)\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t)\hat{E}^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)\rangle. \tag{4.54}$$

これに (4.52), (4.53) を代入し，光子が同時に検出される事象は，左右に放出された光子がともに短い経路 (S_1 と S_2) を通るか，または，ともに長い経路 (L_1 と L_2) を通るかのいずれかであることに注意すると，

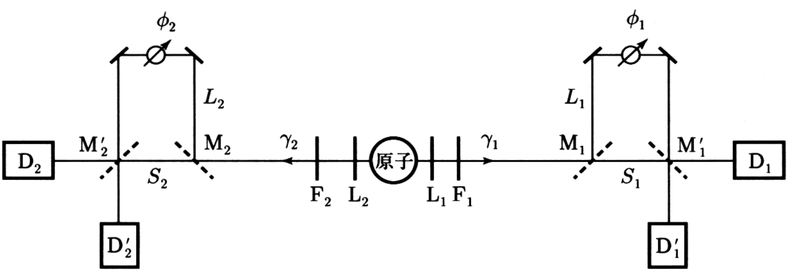


図 4.6 時間的非局所相関の実験の模式図

6) J. D. Franson, Phys. Rev. Lett. **62**, 2205 (1989).

$$R_{\rm c} = \frac{1}{16}\langle[\hat{E}_0^{(-)}(\boldsymbol{r}_1,t)\hat{E}_0^{(-)}(\boldsymbol{r}_2,t) + e^{-i(\phi_1+\phi_2)}\hat{E}_0^{(-)}(\boldsymbol{r}_1,t-\Delta T)\hat{E}_0^{(-)}(\boldsymbol{r}_2,t-\Delta T)]$$
$$\times[\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t) + e^{i(\phi_1+\phi_2)}\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t-\Delta T)\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t-\Delta T)]\rangle \tag{4.55}$$

が得られる．

議論をより具体的にするために，2 つの光子の放出が図 4.7 のようにカスケード的に起こる状況を考えよう．図で τ_1 と τ_2 は，それぞれ準位 1 と準位 2 の寿命であり，$\tau_2 \ll \tau_1$ であると仮定する．このとき，

$$\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t) = \sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2} \hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}\hat{a}_{\boldsymbol{k}_2} e^{i(\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1-\omega_1 t)}e^{i(\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2-\omega_2 t)} \tag{4.56}$$

とおくと

$$\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t-\Delta T)\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t-\Delta T)$$
$$= \sum_{\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2} \hat{a}_{\boldsymbol{k}_1}\hat{a}_{\boldsymbol{k}_2} e^{i(\omega_1+\omega_2)\Delta T} e^{i(\boldsymbol{k}_1\boldsymbol{r}_1-\omega_1 t)}e^{i(\boldsymbol{k}_2\boldsymbol{r}_2-\omega_2 t)} \tag{4.57}$$

となる．ここで，ω_1, ω_2 はイベントごとに揺らぐが両者の和

$$\omega_1+\omega_2 = \frac{E_1-E_3}{\hbar} + \Delta\omega \equiv \frac{\Delta E}{\hbar} + \Delta\omega, \qquad \Delta E \equiv E_1 - E_3 \tag{4.58}$$

と $\Delta E/\hbar$ との差 $\Delta\omega$ は，準位 1, 2 の寿命 τ_1, τ_2 と

$$\Delta\omega \sim \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2} \tag{4.59}$$

なる関係がある．したがって，ΔT を $\Delta T \ll \tau_1, \tau_2$ となるようにすると，$\Delta\omega\Delta T \ll 1$ なので，

$$\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t-\Delta T)\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t-\Delta T)$$
$$\simeq e^{\frac{i}{\hbar}\Delta E\Delta T}\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_1,t)\hat{E}_0^{(+)}(\boldsymbol{r}_2,t) \tag{4.60}$$

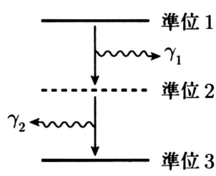


図 4.7　カスケード的に起こる 2 光子放出．準位 1 に励起された原子は τ_1 程度の時間の後に準位 2 へ遷移して光子 γ_1 を放出する．準位 2 の原子は τ_2 程度の時間の後に準位 3 へと遷移して光子 γ_2 を放出する．$\tau_2 \ll \tau_1$ であれば，2 光子の放出はカスケード的に起こる．

となる．これと (4.56) を (4.55) に代入すると，R_c は，

$$R_c \propto \left|1+e^{i(\Delta E\Delta T/\hbar+\phi_1+\phi_2)}\right| = 4\cos^2\frac{\Delta E\Delta T/\hbar+\phi_1+\phi_2}{2} \tag{4.61}$$

となり振動する．逆に，$\Delta T \gg \tau_1, \tau_3$ の場合は，振動は起こらない．この振動現象は，短い経路を通った 2 光子の確率振幅と長い経路を通った 2 光子の確率振幅が干渉する結果生じる．これは，短い経路を通過した光子と長い経路を通過した光子は，ΔT が寿命 τ_1 と τ_2 よりも短い限り時間とエネルギーの不確定性原理により区別ができないために起こる現象である．

4.7.3 2 粒子干渉の一般論

同種 2 粒子の干渉の本質を理解するために，2 粒子が A または B の 2 つの状態しかとらない場合を考える．このとき，初期状態は，

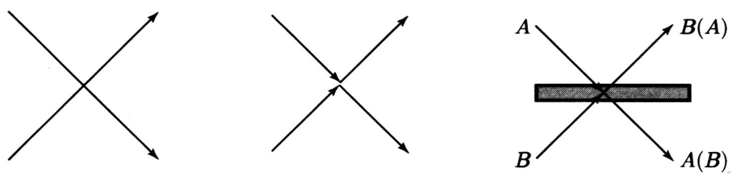
$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle_1|B\rangle_2 + e^{i\phi}|B\rangle_1|A\rangle_2) \tag{4.62}$$

と書ける．ここで，右辺の第 1 項は**直接項**，第 2 項は粒子を交換した**交換項**とよばれる．ϕ は，同種粒子を交換する際につく位相で，粒子が光子のようにボソンの場合は 0，電子のようにフェルミオンの場合は π である．いま，図 4.8(c) のように 2 粒子が上下方向からやって来て，ビームスプリッターで一部分透過させ残りを反射させることを考える．ビームスプリッターの作用 $\hat{U}$ は，A, B それぞれの状態を次のように混ぜることである．

$$\hat{U}|A\rangle = \alpha|A\rangle + \gamma|B\rangle, \tag{4.63}$$

$$\hat{U}|B\rangle = \beta|A\rangle + \delta|B\rangle. \tag{4.64}$$

ここで，係数 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ は，$\hat{U}$ がユニタリー作用素であることから，条件



(a) 直接項　(b) 交換項　(c) ビームスプリッター

図 4.8 同種 2 粒子の確率振幅の干渉

$$|\alpha|^2+|\gamma|^2=1, \quad |\beta|^2+|\delta|^2=1, \quad \alpha^*\beta+\gamma^*\delta=0. \tag{4.65}$$

あるいは，これから，

$$\left.\begin{aligned}\alpha=e^{i\theta_\alpha}\cos\theta, \quad \beta=e^{i\theta_\beta}\sin\theta,\\ \gamma=-e^{i(\theta_\alpha-\theta_\beta+\theta_\delta)}\sin\theta, \quad \delta=e^{i\theta_\delta}\cos\theta\end{aligned}\right\} \tag{4.66}$$

と表される．(4.64) を (4.62) に代入して (4.66) を使うと，

$$\begin{aligned}\hat{U}|\Psi\rangle=&\frac{1}{\sqrt{2}}[(\alpha|A\rangle_1+\gamma|B\rangle_1)(\beta|A\rangle_2+\delta|B\rangle_2)\\ &+e^{i\phi}(\beta|A\rangle_1+\delta|B\rangle_1)(\alpha|A\rangle_2+\gamma|B\rangle_2)].\end{aligned} \tag{4.67}$$

ビームスプリッターの透過率が 50% のときは，$\theta=\pi/4$，$\theta_\alpha=\theta_\beta=\theta_\delta=0$ とおくと，(4.67) は次のようになる．

$$\begin{aligned}\hat{U}|\Psi\rangle=&\frac{1}{2\sqrt{2}}[\ (1+e^{i\phi})(|A\rangle_1|A\rangle_2-|B\rangle_1|B\rangle_2)\\ &+(1-e^{i\phi})(|A\rangle_1|B\rangle_2-|A\rangle_2|B\rangle_1)].\end{aligned} \tag{4.68}$$

したがって，粒子がボソンの場合 ($\phi=0$) は，

$$\hat{U}|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle_1|A\rangle_2-|B\rangle_1|B\rangle_2) \tag{4.69}$$

となり，2粒子は必ずビームスプリッターの同じ側に現れる (同じ状態に見い出される)．このように，ボース粒子は2粒子干渉の結果集まりあう傾向にあり，これを**バンチング効果**とよぶ．他方，フェルミ粒子の場合 ($\phi=\pi$) は，

$$\hat{U}|\Psi\rangle=\frac{1}{\sqrt{2}}(|A\rangle_1|B\rangle_2-|A\rangle_2|B\rangle_1) \tag{4.70}$$

となり，2粒子は必ず反対側に現れることがわかる (異なった状態に見い出される)．このようにフェルミ粒子は互いに避けあう傾向にあり，これを**アンチバンチング効果**とよぶ．フェルミ粒子が避けあう効果は**パウリの排他原理**として知られているが，上記の議論からパウリの排他原理が2粒子干渉の結果と解釈できることがわかる．このような2粒子干渉の実験は，光子 (ボース粒子) に対してはホンら[7]，電子 (フェルミ粒子) に対してはリウら[8]によってなされた．

---

7) C. K. Hong, Z. Y. Ou,and L. Mandel, Phys. Rev. Lett. **59**, 2044 (1987).

8) R. C. Liu, B. Odom, Y. Yamamoto, and S. Tarucha, Nature **391**, 263 (1998).

5. 原子と光との相互作用

原子のエネルギー準位は等間隔ではない．例えば，水素原子のエネルギー準位は，

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} \simeq -\frac{13.6}{n^2}\mathrm{eV} \qquad (n = 1, 2, \cdots)$$

で与えられ，隣り合ったエネルギー準位間隔 $E_{n+1} - E_n$ はすべて異なっている．そこで，原子と相互作用する光子のエネルギー $\hbar\omega_0$ を，原子の特定の 2 つの準位 m と n のエネルギーの差 $E_m - E_n$ にほぼ等しくとれば，他の準位は光との相互作用に寄与しなくなり，原子を m と n の 2 準位で記述するだけで十分である．このように近似された原子を **2 準位原子**とよぶ．このような近似は，周波数が決まったレーザー光と原子が相互作用する場合や，極めて高い反射率をもつ鏡に囲まれた，電磁波の波長程度の微小な空間 (これを**微小共振器**という) に閉じ込められた原子が，決まった波長の電磁場と相互作用する場合に有効である．2 準位原子は，量子コンピューターの基本単位 —これを**量子ビット**，または，英語の頭文字 (quantum bit) をとって**キュービット**とよぶ— としても重要である．本章では 2 準位原子と光との相互作用を題材として，量子論のさまざまな側面について述べる．

5.1 ジェインズ–カミングス模型

2 準位原子を考え，エネルギーの高い準位を上準位，低い準位を下準位とよぼう．上準位にある原子の状態を $|\mathrm{u}\rangle$，下準位にある原子の状態を $|\mathrm{d}\rangle$ と記す．このとき，原子の状態は 2 次元ベクトルで記述される．

$$|\mathrm{u}\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\mathrm{d}\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{5.1}$$

原子のハミルトニアンは，2 準位間のエネルギーの差を $\hbar\omega$，両者の中間をエネルギーの原点にとると次のように書ける．

$$\hat{H}_{\mathrm{atom}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}\hbar\omega \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z. \tag{5.2}$$

ここで，$\hat{\sigma}_z$ は**パウリ行列**の z 成分である．

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{5.3}$$

このとき，原子に対する固有値方程式は次のように書ける．

$$\hat{H}_{\mathrm{atom}}|\mathrm{u}\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega|\mathrm{u}\rangle, \tag{5.4}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{atom}}|\mathrm{d}\rangle = -\frac{1}{2}\hbar\omega|\mathrm{d}\rangle. \tag{5.5}$$

下準位にある原子を上準位に遷移させる演算子を**昇演算子**といい $\hat{\sigma}_+$ と記す．逆に，上準位にある原子を下準位に遷移させる演算子を**降演算子**といい $\hat{\sigma}_-$ と記す．これらをまとめて**昇降演算子**とよぶ．昇降演算子を行列表示すると，

$$\hat{\sigma}_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{5.6}$$

と書ける．これらが次の性質を満たしていることは容易に示せる．

$$\hat{\sigma}_+|\mathrm{d}\rangle = |\mathrm{u}\rangle, \qquad \hat{\sigma}_+|\mathrm{u}\rangle = 0, \qquad \hat{\sigma}_-|\mathrm{u}\rangle = |\mathrm{d}\rangle, \qquad \hat{\sigma}_-|\mathrm{d}\rangle = 0. \tag{5.7}$$

昇降演算子は，パウリ行列の x 成分 $\hat{\sigma}_x$ と y 成分 $\hat{\sigma}_y$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{5.8}$$

を用いて次のように表すことができる．

$$\hat{\sigma}_\pm = \frac{\hat{\sigma}_x \pm i\hat{\sigma}_y}{2}. \tag{5.9}$$

問題 5.1 次の交換関係を示せ．

$$[\hat{\sigma}_+, \hat{\sigma}_-] = \hat{\sigma}_z, \qquad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_+] = 2\hat{\sigma}_+, \qquad [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_-] = -2\hat{\sigma}_-. \tag{5.10}$$

2準位原子が，周波数が ω_0 の単一モードの電磁場と相互作用する状況を考えよう．電磁場のハミルトニアンは零点エネルギーを無視すると，$\hbar\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a}$ と書ける．原子と電磁場の相互作用の素過程は，

下準位にある原子が光子を1個吸収して上準位へと遷移する過程 $= \hat{\sigma}_+ \hat{a}$,
上準位にある原子が光子を1個放出して下準位へと遷移する過程 $= \hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger$

で記述される．

量子力学的には，上準位にある原子が光子を吸収して下準位に遷移したり，下準位にある原子が光子を放出して上準位へ遷移する過程も許される．しかし，このような過程はエネルギーを保存しないので，エネルギーと時間の不確定性から決まる短い時間

$$\Delta t \sim (\omega + \omega_0)^{-1} \tag{5.11}$$

の間でしか起こりえず，その効果は多くの場合無視できる．このような効果を無視する近似を**回転波近似**とよび，以下ではこの近似を用いる．このとき，原子と電磁場との相互作用ハミルトニアンは，

$$\hbar g(\hat{\sigma}_+ \hat{a} + \hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger)$$

と書ける．ここで，$\hbar g$ は相互作用の強さを表す定数である．こうして，2準位原子と単一モードの電磁場との相互作用を記述するハミルトニアンは，次のように書ける．

$$\hat{H}_{\rm JC} = \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z + \hbar\omega_0 \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hbar g \left(\hat{\sigma}_+ \hat{a} + \hat{\sigma}_- \hat{a}^\dagger \right). \tag{5.12}$$

ここで，電磁場の零点エネルギー $\hbar\omega_0/2$ は定数なので無視した．(5.12) は**ジェインズ–カミングス・ハミルトニアン**とよばれる．

5.2 ラビ分裂とラビ振動

ハミルトニアン (5.12) のエネルギー固有値を求めよう．シュレーディンガー方程式

$$\hat{H}_{\rm JC}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{5.13}$$

の固有関数として次式を仮定する．

$$|\Psi\rangle = \sin\theta_n|\mathrm{u}, n\rangle + \cos\theta_n|\mathrm{d}, n+1\rangle. \tag{5.14}$$

ここで，$|\mathrm{u}, n\rangle$ は，原子が上準位 $|\mathrm{u}\rangle$ にあり，光子が n 個存在する状態を表すものとする．同様に，$|\mathrm{d}, n+1\rangle$ は，原子は下準位 $|\mathrm{d}\rangle$ にあり，光子が $n+1$ 個存在する状態を表している．ジェインズ–カミングス模型では，$n = 0, 1, 2, \cdots$ の各値に対して，状態 $|\mathrm{u}, n\rangle$ と $|\mathrm{d}, n+1\rangle$ だけが結合するので，各 n に対して (5.14) の解を求めることができれば，それを用いて任意の解が構成できる．(5.14) を (5.13) に代入して固有値方程式を解くと，次のような 2 つの固有値とそれに対応する固有状態が得られる．

$$\begin{aligned} E_+ &= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar\Delta_n}{2}, \\ |\Psi_+\rangle &= \sin\theta_n|\mathrm{u}, n\rangle + \cos\theta_n|\mathrm{d}, n+1\rangle, \end{aligned} \tag{5.15}$$

$$\begin{aligned} E_- &= \hbar\omega_0\left(n+\frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar\Delta_n}{2}, \\ |\Psi_-\rangle &= \cos\theta_n|\mathrm{u}, n\rangle - \sin\theta_n|\mathrm{d}, n+1\rangle. \end{aligned} \tag{5.16}$$

ここで，$\Delta_n \equiv \sqrt{4g^2(n+1)+\delta^2}$．また，$\delta \equiv \omega - \omega_0$ は周波数の共鳴からのずれを表しており，**離調周波数**とよばれる．さらに，$\sin\theta_n$ と $\cos\theta_n$ は次のように与えられる．

$$\begin{aligned} \sin\theta_n &= \frac{2g\sqrt{n+1}}{\sqrt{(\Delta_n-\delta)^2+4g^2(n+1)}}, \\ \cos\theta_n &= \frac{\Delta_n-\delta}{\sqrt{(\Delta_n-\delta)^2+4g^2(n+1)}}. \end{aligned} \tag{5.17}$$

問題 5.2 固有値と固有エネルギーが，上記のように与えられることを確かめよ．

【解答】 (5.14) を (5.13) に代入して，両辺の $|\mathrm{u}, n\rangle$ と $|\mathrm{d}, n+1\rangle$ の係数をそれぞれ等しくおくと，

$$\begin{pmatrix} E - \hbar\left(\frac{\omega}{2} + n\omega_0\right) & -\hbar g\sqrt{n+1} \\ -\hbar g\sqrt{n+1} & E - \hbar\left(-\frac{\omega}{2} + (n+1)\,\omega_0\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin\theta_n \\ \cos\theta_n \end{pmatrix} = 0$$

が得られる．$\sin\theta_n$ と $\cos\theta_n$ は同時には 0 とならないので，係数の行列式が 0 とならなければならない．

$$\left[E - \hbar\left(\frac{\omega}{2} + n\omega_0\right)\right]\left[E + \hbar\left(\frac{\omega}{2} - (n+1)\omega_0\right)\right] - (\hbar g)^2(n+1) = 0.$$

これを解くと (5.15), (5.16) が得られる． ∎

(5.15), (5.16) から，電磁場と結合した原子のエネルギー準位が 2 つに分裂し，その差が，

$$\Delta E \equiv E_{+} - E_{-} = \hbar\Delta_n = \hbar\sqrt{4g^2(n+1)+\delta^2} \tag{5.18}$$

で与えられることがわかる．これを**ラビ分裂**という．特に，初め電磁場が真空状態 $(n=0)$ にあっても，原子のエネルギー準位は $\hbar\sqrt{4g^2+\delta^2}$ だけ分裂する．これを**真空ラビ分裂**という[1]．

(5.15), (5.16) のような電磁場と結合した状態にある原子は，あたかも電磁場のドレスをまとった原子のようにみえるので，**ドレストアトム**とよばれる．原子と結合する光の強さ ($\propto$ 光子数) を増すと，ドレストアトムのエネルギー準位の一方 (E_{+}) は増加し，他方 (E_{-}) は減少する．これから，空間的に変化する電場中に置かれた原子は，$\boldsymbol{F}_{\pm} = -\nabla E_{\pm}$ なる力を受ける．これを**双極子力**という．

次に，ジェインズ–カミングス模型における状態の時間発展を調べる．時刻 $t=0$ で原子は上準位 $|\mathrm{u}\rangle$ にあり，電磁場は光子数状態 $|n\rangle$ にあるとしよう．

$$|\Psi(t=0)\rangle = |\mathrm{u}\rangle|n\rangle \equiv |\mathrm{u}, n\rangle. \tag{5.19}$$

系の時間発展は，シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_n(t)\rangle = \hat{H}_{\mathrm{JC}}|\Psi_n(t)\rangle \tag{5.20}$$

に従う．(5.20) を形式的に積分すると，

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\mathrm{JC}}t}|\Psi(0)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\mathrm{JC}}t}|\mathrm{u}, n\rangle \tag{5.21}$$

と書ける．ここで，(5.15), (5.16) を逆に解くことにより，状態 $|\mathrm{u}, n\rangle$ がハミルトニアン $\hat{H}_{\mathrm{JC}}$ の固有状態 $|\Psi_{\pm}\rangle$ を用いて，次のように展開できることがわかる．

$$|\mathrm{u}, n\rangle = \sin\theta_n|\Psi_{+}\rangle + \cos\theta_n|\Psi_{-}\rangle.$$

これを (5.21) に代入して，状態 $|\Psi_{\pm}\rangle$ の固有エネルギーが $E_{\pm}$ であることを使うと，

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\mathrm{JC}}t}(\sin\theta_n|\Psi_{+}\rangle + \cos\theta_n|\Psi_{-}\rangle)$$

---

1)　ラビ分裂の実験例は，M. G. Raizen, R. J. Thompson, R. J. Brecha, H. J. Kimble, and H. J. Carmichael, Phys. Rev. Lett. **63**, 240 (1989).

$$
\begin{aligned}
&= \sin\theta_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}|\Psi_+\rangle + \cos\theta_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}|\Psi_-\rangle \\
&= (e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t}\sin^2\theta_n + e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t}\cos^2\theta_n)|\mathrm{u}, n\rangle \\
&\quad + (e^{-\frac{i}{\hbar}E_+t} - e^{-\frac{i}{\hbar}E_-t})\sin\theta_n\cos\theta_n|\mathrm{d}, n+1\rangle.
\end{aligned}
$$

これに (5.15), (5.16) の $E_\pm$ を代入すると，次の結果が得られる．

$$
|\Psi(t)\rangle = e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega_0 t}\left[\left(\cos\frac{\varDelta_n t}{2} + i\sin\frac{\varDelta_n t}{2}\cos 2\theta_n\right)|\mathrm{u}, n\rangle - i\sin\frac{\varDelta_n t}{2}\sin 2\theta_n|\mathrm{d}, n+1\rangle\right]. \tag{5.22}
$$

ここで，(5.17) より

$$
\sin 2\theta_n = 2\sin\theta_n\cos\theta_n = \frac{4g\sqrt{n+1}(\varDelta_n - \delta)}{(\varDelta_n - \delta)^2 + 4g^2(n+1)} \tag{5.23}
$$

なので，原子遷移周波数と光子の周波数の差 δ が大きくなると原子は下準位へ遷移しにくくなる．逆に，両者が共鳴する場合 ($\omega_0=\omega$, $\delta=0$) は，

$$
\varDelta_n = 2g\sqrt{n+1}, \qquad \sin 2\theta_n = 1
$$

となるので，系の時間発展は次のように与えられる．

$$
|\Psi_n(t)\rangle = e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t}\left[\cos(g\sqrt{n+1}t)|\mathrm{u}, n\rangle - i\,\sin(g\sqrt{n+1}t)|\mathrm{d}, n+1\rangle\right]. \tag{5.24}
$$

(5.24) から，時刻 t に原子が上準位に見出される確率 $P_{\mathrm{up}}(t)$ および下準位に見出される確率 $P_{\mathrm{down}}(t)$ は，それぞれ次のように与えられる．

$$
P_{\mathrm{up}}(t) = |\langle \mathrm{u}, n|\Psi_n(t)\rangle|^2 = \cos^2(g\sqrt{n+1}t), \tag{5.25}
$$

$$
P_{\mathrm{down}}(t) = |\langle \mathrm{d}, n+1|\Psi_n(t)\rangle|^2 = \sin^2(g\sqrt{n+1}t). \tag{5.26}
$$

また，時刻 t における光子数の期待値は次のように与えられる．

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{n}(t)\rangle &= \langle \Psi_n(t)|\hat{a}^\dagger\hat{a}|\Psi_n(t)\rangle \\
&= n + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(2g\sqrt{n+1}\,t) \\
&= n + P_{\mathrm{down}}(t).
\end{aligned} \tag{5.27}
$$

このように，原子は決まった周波数

$$
\Omega_{\mathrm{Rabi}} = 2g\sqrt{n+1} \tag{5.28}
$$

で光子の吸収と放出をくり返す．これを**ラビ振動**または**ラビ章動**という．また Δ_n や $\Omega_{\rm Rabi}$ は**ラビ周波数**とよばれる．特に，電磁場の初期状態が真空状態の場合，すなわち，$n=0$ の場合も原子の初期状態が上準位であれば，ラビ振動が起こる[2)].

5.3　崩壊現象と復活現象

電磁場の初期状態がコヒーレント状態 (3.8 節参照)

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle \tag{5.29}$$

である場合を考えよう．原子が上準位にあるとすると全系の初期状態は，

$$|{\rm u}, \alpha; t=0\rangle = |{\rm u}\rangle \otimes |\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |{\rm u}, n\rangle \tag{5.30}$$

と書ける．シュレーディンガー方程式の線形性から状態 (5.30) の時間発展は，

$$|{\rm u}, \alpha; t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{\rm JC}t} |{\rm u}, \alpha; t=0\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\Psi_n(t)\rangle \tag{5.31}$$

と書ける．これに，(5.24) を代入すると，

$$\begin{aligned} |{\rm u}, \alpha; t\rangle &= e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t} \\ &\quad \times \left[\cos(g\sqrt{n+1}t)|{\rm u}, n\rangle - i\,\sin(g\sqrt{n+1}t)|{\rm d}, n+1\rangle\right] \end{aligned} \tag{5.32}$$

が得られる．平均光子数の時間発展は，状態 (5.32) に対する光子数演算子の期待値として求められる．すなわち，

$$\begin{aligned} \langle \hat{n}(t)\rangle &\equiv \langle {\rm u}, \alpha; t|\hat{a}^\dagger \hat{a}|{\rm u}, \alpha; t\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \left[n\cos^2(g\sqrt{n+1}t) + (n+1)\sin^2(g\sqrt{n+1}t)\right] \\ &= \bar{n} + e^{-\bar{n}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{n}^n}{n!} \sin^2 g\sqrt{n+1}t. \end{aligned} \tag{5.33}$$

ここで，$\bar{n} \equiv |\alpha|^2$ は初期状態の平均光子数である．これを図示したものが図 5.1 である．平均光子数は時間的に振動するが，その振幅は時間とともに減衰する

---

2)　ラビ振動の実験例は，G. Rempe, H. Walther, and N. Klein, Phys. Rev. Lett. **58**, 353 (1987).

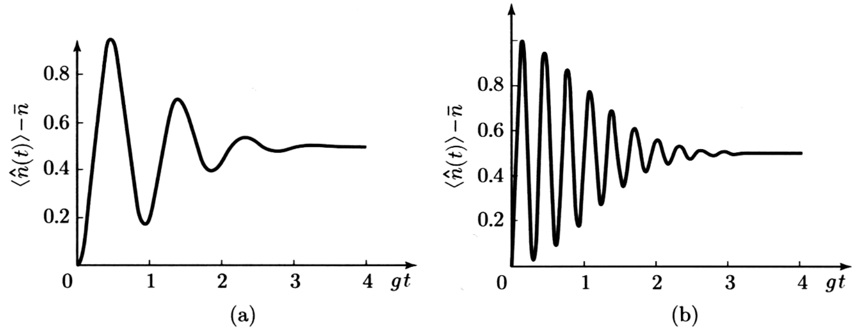


図 5.1 平均光子数の短時間での時間変化．振動の振幅が減衰する様子がわかる．初期状態は原子が上準位，電磁場はコヒーレント状態で，初期状態の平均光子数は，(a) では $\bar{n} = |\alpha|^2 = 10$，(b) では $\bar{n} = 100$ である．

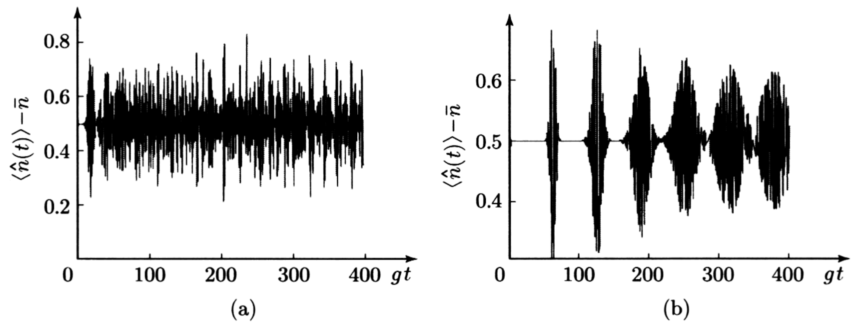


図 5.2 平均光子数の長時間での時間変化．いったん減衰して消えたようにみえる振動が，再び復活する様子がわかる．初期状態は原子が上準位，電磁場はコヒーレント状態で，初期状態の平均光子数は，(a) では $\bar{n} = |\alpha|^2 = 10$，(b) では $\bar{n} = 100$ である．

ことがわかる．これを，(振動の) **崩壊現象**という．振動が減衰する理由は，コヒーレント状態がいろいろな光子数状態の重ね合わせであることから，さまざまなラビ振動数 (5.28) をもった成分が (5.33) のように重なり合い，成分間の位相差が時間の経過とともにばらばらになるからである．崩壊現象は，有理比でないさまざまな振動数をもった成分が共存すれば起こるので，光の強度が連続的に分布する古典論の場合にも起こる．

図 5.2 は，平均光子数 $\langle\hat{n}(t)\rangle$ の長時間にわたる振舞いを示したものである．興味深いことに，図 5.1 のように，いったんは完全に減衰したようにみえる振動が十分長い時間の後に復活する．この**復活現象**は，光子のエネルギーが $\hbar\omega$ で量子化されているために起こり，電磁場が量子化されていることの証拠となっている (5.4 節参照)[3]．崩壊現象とは異なり復活現象は，古典論のように光の強度が連続的な値をとる場合は生じない量子論に特有の現象である．

図 5.2(b) をみると，復活現象も周期的に起こっているようにみえる．その周期を近似的に求めよう．(5.33) より

$$\langle\hat{n}(t)\rangle = \bar{n} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}e^{-\bar{n}}\,\mathrm{Re}\left\{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\bar{n}^n}{n!}e^{2ig\sqrt{n+1}t}\right\}. \tag{5.34}$$

ここで，$\mathrm{Re}\{\cdots\}$ は $\{\ \}$ 内の実部をとることを意味している．ポアソン分布の粒子数揺らぎは $\sqrt{\bar{n}}$ なので，$\bar{n} \gg 1$ ならば平均値 $\bar{n}$ に比べて十分に小さい．そこで，$\{\ \}$ 内の指数部分の平方根は $\delta n = n - \bar{n}$ とおくと，

$$\begin{aligned}\sqrt{n+1} &= \sqrt{\bar{n}}\left(1+\frac{\delta n+1}{\bar{n}}\right)^{\frac{1}{2}} \simeq \sqrt{\bar{n}}\left(1+\frac{\delta n+1}{2\bar{n}}\right)\\ &= \frac{n+\bar{n}+1}{2\sqrt{\bar{n}}}\end{aligned} \tag{5.35}$$

となる．したがって，

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\bar{n}^n}{n!}e^{2ig\sqrt{n+1}t} &\simeq e^{ig\sqrt{\bar{n}}\left(1+\frac{1}{\bar{n}}\right)t}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\bar{n}^n}{n!}e^{i\frac{gt}{\sqrt{\bar{n}}}n}\\ &= e^{ig\sqrt{\bar{n}}\left(1+\frac{1}{\bar{n}}\right)t}\exp\left(\bar{n}e^{i\frac{gt}{\sqrt{\bar{n}}}}\right)\\ &= e^{ig\sqrt{\bar{n}}\left(1+\frac{1}{\bar{n}}\right)t}\exp\left[\bar{n}\left(\cos\frac{gt}{\sqrt{\bar{n}}}+i\sin\frac{gt}{\sqrt{\bar{n}}}\right)\right].\end{aligned} \tag{5.36}$$

これを (5.34) に代入すると，

$$\langle\hat{n}(t)\rangle \simeq \bar{n} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2}e^{-\bar{n}\left(1-\cos\frac{gt}{\sqrt{\bar{n}}}\right)}\cos\left[g\sqrt{\bar{n}}\left(1+\frac{1}{\bar{n}}+\frac{\sqrt{\bar{n}}}{gt}\sin\frac{gt}{\sqrt{\bar{n}}}\right)t\right]. \tag{5.37}$$

右辺の最後の余弦の項はラビ振動を表しており，その前の指数因子

$$f(t) = e^{-\bar{n}\left(1-\cos\frac{gt}{\sqrt{\bar{n}}}\right)} \tag{5.38}$$

---

3) 復活現象の実験例は，G. Rempe, H. Walther, and N. Klein, Phys. Rev. Lett. **58**, 353 (1987).

がラビ振動の振幅の時間変化 (包絡線) を記述している．$f(t)$ は $t=0$ で値 1 をとるが，$t \ll \sqrt{\bar{n}}/g$ なる時間では $f(t) \simeq e^{-(gt)^2/2}$ と展開できる．したがって，振動の崩壊は，

$$T^{\text{崩壊}} \simeq \frac{1}{g} \tag{5.39}$$

程度の時間で起こることがわかる．他方，復活現象の周期は (5.38) から

$$T^{\text{復活}} \simeq \frac{2\pi}{g}\sqrt{\bar{n}} \tag{5.40}$$

で与えられることがわかる．$\bar{n}=100$ を代入すると $gT^{\text{復活}} \simeq 20\pi$ となり，図 5.2 (b) の復活の周期をよく再現していることがわかる．

5.4 量子回帰定理

古典力学では，粒子の運動が有限の領域に限られている場合，任意の初期状態に対して，それにいくらでも近い状態に有限の時間で戻ってくることが示される．これを**ポアンカレの回帰定理**という．量子力学においては，有限系のエネルギー準位は離散的であるために，系の時間発展は各準位に対応する周期運動の離散的な重ね合わせとして記述することができる．このことから，回帰定理の量子力学版というべき次の定理が導かれる[4)]．

量子回帰定理 任意の初期時刻 t_0 と任意の正の数 ϵ に対して，

$$\| |\Psi(T)\rangle - |\Psi(t_0)\rangle \| < \epsilon$$

が成立するような時間 $T(> t_0)$ が存在する．

証明の概略は次のとおりである．有限系のエネルギー固有値は離散的に分布するので，固有値と固有状態をそれぞれ E_n, $|n\rangle$ と書けば，シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

の解は一般に次のように展開できる．

4) P. Bocchieri and A. Loinger, Phys. Rev. **107**, 337 (1957).

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}|n\rangle.$$

よって，

$$\||\Psi(T)\rangle - |\Psi(t_0)\rangle\|^2 = 2\sum_{n=0}^{\infty} |a_n|^2 \left(1 - \cos\frac{E_n(T-t_0)}{\hbar}\right) \tag{5.41}$$

となる．$\sum_n |a_n|^2 = 1$ なので，任意の正の実数 ϵ に対して十分大きな N をとれば，

$$\sum_{n=N}^{\infty} |a_n|^2 \left(1 - \cos\frac{E_n(T-t_0)}{\hbar}\right) \le \sum_{n=N}^{\infty} |a_n|^2 < \frac{\epsilon^2}{2} \tag{5.42}$$

とすることができる．(5.41) の残りの項の寄与は，不等式 $|a-b| \le |a-c|+|c-b|$ を用いると，

$$\begin{aligned}
&2\sum_{n=0}^{N-1} |a_n|^2 \left(1 - \cos\frac{E_n(T-t_0)}{\hbar}\right)\\
&= \sum_{n=0}^{N-1} \left||a_n| - |a_n|e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(T-t_0)}\right|^2\\
&\le \sum_{n=0}^{N-1} \left(\left||a_n| - r_n e^{i\phi_n - \frac{i}{\hbar}E_n(T-t_0)}\right|^2 + \left|r_n e^{i\phi_n - \frac{i}{\hbar}E_n(T-t_0)} - |a_n|e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(T-t_0)}\right|^2\right)\\
&= \sum_{n=0}^{N-1} \left(\left||a_n| - r_n e^{i\phi_n - \frac{i}{\hbar}E_n(T-t_0)}\right|^2 + \left|r_n e^{i\phi_n} - |a_n|\right|^2\right).
\end{aligned} \tag{5.43}$$

ここで，r_n, ϕ_n は任意の実数である．(5.43) の右辺が $\epsilon^2/2$ よりも小さくできることがいえれば，これと (5.42) から $\||\Psi(T)\rangle - |\Psi(t_0)\rangle\|^2 < \epsilon^2$ が成立して証明が完成するが，これはポアンカレの回帰定理を用いて証明できる[5)]．N 個の独立な 2 次元古典的調和振動子を考え，その振幅と位相をそれぞれ r_n, ϕ_n $(n = 0, 1, 2, \cdots, N-1)$ としよう．このとき，n 番目の調和振動子の座標 (x_n, y_n) は，

$$x_n(t) = r_n \cos\left(\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar} - \phi_n\right), \qquad y_n(t) = -r_n \sin\left(\frac{E_n(t-t_0)}{\hbar} - \phi_n\right).$$

あるいは，複素表示を用いて，

$$z_n(t) \equiv x_n(t) + iy_n(t) = r_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0) + i\phi_n}$$

と書ける．ここで，$\hbar$ は証明の便宜上導入された定数であり，振動子が古典的であることと矛盾しない．r_n と ϕ_n を初期時刻 t_0 で，

5) L. S. Schulman, Phys. Rev. A **18**, 2379 (1978).

$$\sum_{n=0}^{N-1}\left||a_n| - r_n e^{i\phi_n}\right|^2 \leq \frac{\epsilon^2}{4} \tag{5.44}$$

を満足するように選べば，ポアンカレの回帰定理によりある時刻 $T(> t_0)$ が存在して，その時刻に対して，

$$\sum_{n=0}^{N-1}\left||a_n| - r_n e^{i\phi_n - \frac{i}{\hbar}E_n(T-t_0)}\right|^2 \leq \frac{\epsilon^2}{4} \tag{5.45}$$

が成立する．(5.44), (5.45) を (5.43) に代入することで題意は証明される．

5.3 節で述べた，崩壊と復活現象の関連でいうと，光子も原子もエネルギーが離散的なので，全系のエネルギーも離散的である．したがって，上記の証明がそのまま当てはまるので，振動の復活が起こる．

5.5 量子ゼノン効果

標的めがけて飛んでいる矢を想像しよう．矢が標的に到達するまでには，まず標的までの中間点に到達しなければならない．次に，中間点から標的までの中間点に到達しなければならない．同様な考察をくり返すと，矢はいつまでたっても標的には到達できないというパラドックスに陥る．これは，古代ギリシャの哲学者ゼノンが指摘したパラドックスで，**ゼノンのパラドックス**とよばれる．このパラドックスの解決は，

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{4} + \frac{1}{8} \cdots = \frac{\frac{1}{2}}{1-\frac{1}{2}} = 1$$

という無限級数の知識が必要であり，このような数学が発達する以前は確かにパラドックスであったことが理解できる．

量子論において，類似のパラドックスが存在することがミスラとスダルシャンによって指摘された[6)]．それは，量子系を連続的にずっと観測しつづけると，その系は他の状態に遷移できないというものであり，古典的なゼノンのパラドックスとの類似から**量子ゼノンパラドックス**，または**量子ゼノン効果**とよばれる．

6) B. Misra and E. C. G. Sudarshan, J. Math. Phys. **18**, 756 (1977); 量子ゼノン効果を実証した実験としては，W. M. Itano, D. J. Heinzen, J. J. Bollinger, and D. J. Wineland, Phys. Rev. A **41**, 2295 (1990).

量子ゼノン効果の一例として，5.2 節で述べたラビ振動を考えよう．初め上準位の原子が時間 t の後も原子がなお上準位にある確率は，(5.25) より

$$P_{\mathrm{up}}(t) = \cos^2(g\sqrt{n+1}t) \tag{5.46}$$

で与えられる．これから，時間

$$T = \frac{\pi}{2g\sqrt{n+1}} \tag{5.47}$$

の後には，原子は確実に下準位に遷移することがわかる．さて，時間 T を N 等分して，$\Delta t = T/N$ ごとに原子の状態を観測することを考えよう．まず，Δt 後に原子が上準位で見出される確率は，

$$P_{\mathrm{up}}(\Delta t) = \cos^2(g\sqrt{n+1}\Delta t) = \cos^2\left(\frac{g\sqrt{n+1}T}{N}\right). \tag{5.48}$$

このとき，次の Δt 後にも原子が上準位で見出される確率は $(P_{\mathrm{up}}(\Delta t))^2$ で与えられる．同様に考えて，N 回の観測の間，原子がずっと上準位に存在しつづける確率は $(P_{\mathrm{up}}(\Delta t))^N = (P_{\mathrm{up}}(T/N))^N$ で与えられる．観測をする時間間隔 Δt を短くして，観測回数 $N = T/\Delta t$ を大きくする極限をとると，

$$\begin{aligned}\lim_{N\to\infty}\left(P_{\mathrm{up}}\left(\frac{T}{N}\right)\right)^N &= \lim_{N\to\infty}\left[\cos\left(\frac{g\sqrt{n+1}T}{N}\right)\right]^{2N} \\ &= \lim_{N\to\infty}\left[1 - \frac{g^2(n+1)T^2}{2N^2}\right]^{2N} \\ &= \lim_{N\to\infty}\exp\left(-\frac{g^2(n+1)T^2}{N}\right) = 1.\end{aligned} \tag{5.49}$$

したがって，原子を連続して観測しつづけると，原子は上準位に留まりつづけ，下準位へ遷移しない．この結果は，観測しなければ，原子が時間 $t = T$ の後に確実に下準位へ遷移していること ((5.46), (5.47) 参照) と著しい対照をなしている．量子ゼノンパラドックスとよばれるゆえんである．この現象の本質は，量子遷移確率の立ち上がりが時間に比例せず，時間の 2 乗に比例することにある ((5.49) の右辺 2 行目の式参照)．すなわち，時間 T/N の間に下準位へと遷移する確率は $(T/N)^2$ に比例するので，N 回の観測回数で遷移する確率の総和は $(T/N)^2 \times N = T^2/N$ に比例し，これは $N \to \infty$ で 0 になる．

5.6 アインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン相関

図 5.3(a) のように，原子源から出射される原子にレーザー光を照射して励起し，それを真空状態にある共振器を通過させる実験を考える．初期状態が原子が上準位で光子数が 0 の場合の時間発展は，(5.24) で $n=0$ の場合に相当するので，

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{2}\omega t}(\cos gt|\mathrm{u},0\rangle - i\,\sin gt|\mathrm{d},1\rangle) \tag{5.50}$$

で与えられる．ここで，t は共振器の通過時間である．共振器を通過後は，原子と共振器に残された光子は空間的には分離され，原子の状態は共振器から離れた検出器によって測定される．

注目すべき点は，原子の状態が測定されるまでは，原子と光子はたとえ空間的に離れていても (5.50) の重ね合わせの状態にあることである．全系のエネルギーは保存するので，原子が上準位にあれば共振器中の光子数は 0 であり $|\mathrm{u},0\rangle$，原子が下準位にあれば共振器中には光子が 1 個存在する $|\mathrm{d},1\rangle$．この相関はエネルギー保存則の結果であり古典論でも存在する．量子論に特有な点は，測定が行われるまでは原子の状態も光子の状態も決まっておらず，**重ね合わせの状態**にあるということにある．そして，共振器中の光子の状態は空間的に離れた

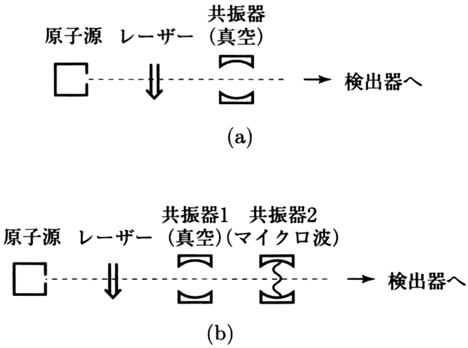


図 5.3 非局所相関の実験
(a) 原子源から出射された原子はレーザー光により上準位へ励起された後，真空の共振器を通過し，そこで共鳴する電磁場モードと相互作用をする．共振器から出て来た原子の状態は，検出器で測定される．
(b) 共振器 1 と原子の検出器の間に別の共振器 2 を置き，原子がそこを通過する際にマイクロ波を照射してラビ振動を起こさせる．

原子の状態を測定した瞬間に確定する．このような**非局所相関**は，それを最初に指摘した人々の名前にちなんで**アインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン相関** (Einstein-Podolsky-Rosen correlation)，略して，**EPR 相関**とよばれる[7]．

しかし，これに対しては次のような反論が想定される．原子と光子の状態はそれらが相互作用を終えた時点，すなわち，原子が共振器を出た時点で確定しているが，原子と光が局所的に (すなわち，同じ場所で) 相互作用しているときに，何らかの理由で未知の (隠れた) 確率的要素が加わり，その結果，測定結果がランダムに変化する，という主張である．これを局所的な**隠れた変数理論**とよばれている．

非局所性を予言する量子論と，相関の起源が局所的であるとみなす局所的隠れた変数理論[8]のどちらが正しいかを調べるために，図 5.3(b) のように共振器 1 と原子の検出器の間に別の共振器 2 を置き，原子がそこを通過する際にマイクロ波を照射してラビ振動を起こさせる．その結果，原子の状態 $|\mathrm{u}\rangle$, $|\mathrm{d}\rangle$ はそれぞれ上準位と下準位の重ね合わせの状態へと時間発展する．

$$|\mathrm{u}\rangle \to \cos\theta|\mathrm{u}\rangle - \sin\theta|\mathrm{d}\rangle, \qquad |\mathrm{d}\rangle \to \sin\theta|\mathrm{u}\rangle + \cos\theta|\mathrm{d}\rangle. \tag{5.51}$$

ここで，θ はマイクロ波の強さや相互作用時間に依存する定数である．この変換は，一般にはユニタリー行列であるが，議論を簡単にするために実直交行列に選んでいる．(5.51) を (5.50) に代入すると (共通の因子 $e^{-\frac{i}{2}\omega t}$ は省略する)

$$\begin{aligned}|\Psi(t)\rangle &= \cos gt|\mathrm{u},0\rangle - i\,\sin gt|\mathrm{d},1\rangle \\ &\quad\longrightarrow \cos gt(\cos\theta|\mathrm{u}\rangle - \sin\theta|\mathrm{d}\rangle)|0\rangle - i\,\sin gt(\sin\theta|\mathrm{u}\rangle + \cos\theta|\mathrm{d}\rangle)|1\rangle \\ &= (\cos gt\cos\theta|0\rangle - i\,\sin gt\sin\theta|1\rangle)|\mathrm{u}\rangle - (\cos gt\sin\theta|0\rangle \\ &\quad + i\,\sin gt\cos\theta|1\rangle)|\mathrm{d}\rangle \end{aligned} \tag{5.52}$$

が得られる．この後に原子の状態を測定して原子が，例えば上準位 $|\mathrm{u}\rangle$ にあると観測されると，共振器に残された光子の状態はそれに対して直接には何の操作も行っていないにもかかわらず，マイクロ波を照射する前の状態 $|0\rangle$ から $\cos gt\cos\theta|0\rangle - i\,\sin gt\sin\theta|1\rangle$ へと変化する．

---

7) A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).

8) これに対して，D. Bohm は相関の起源の非局所性を認める非局所的な隠れた変数理論を提案した．D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 166 (1952); **85**, 180 (1952). この理論は，量子力学と同じ観測結果を予言し，したがって，実験結果と矛盾しない．

このように，2つの系の間にひとたび量子相関ができると，一方の系の状態を操作することによって，空間的に離れたもう一方の系の状態を変化させることができる．この非局所性が，**EPRのパラドックス**の本質である．また，共振器1で原子と光子の相互作用が終了した後に共振器2でマイクロ波を照射するかしないかを選択でき，それによって共振器1中の光子の状態が，フォック状態 $|0\rangle, |1\rangle$ か (5.52) のようなそれらの重ね合わせの状態に変化する．これを**遅延選択**とよぶ．

量子論に内在する非局所相関や遅延選択の可能性は，我々の日常経験と鋭く対立するが，実験によって正しいことが確かめられている．局所的な隠れた変数理論は否定され，量子論の予言する非局所相関が確かめられた．遅延選択の実験は，「測定が行われるまでは実在というものを考えてはいけない，確率振幅という情報のみが存在する」と主張するコペンハーゲン解釈の正当性を印象深く示している．実験結果の奇妙さ，不思議さを解消してくれる明快な説明を我々はいまだもたないが，現在では，それらの結果を正しいものとして受け入れるだけではなく，量子情報処理の分野に応用しようという段階に研究が進んでいる[9)]．

問題 5.3 量子論の予言する非局所相関が，古典相関とどこが異なりなぜ不思議なのかを自分の言葉で述べよ．

5.7 複数の原子と光との相互作用

複数の原子がある特定の電磁場モードと相互作用する場合を考えよう．電磁場モードは，(3.84) を一般化した

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r}) = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0}}\left[\hat{a}\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) - \hat{a}^\dagger\boldsymbol{u}^*(\boldsymbol{r})\right] \tag{5.53}$$

で与えられる．ここで，$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r})$ はモード関数とよばれ，その具体的な形は境界条件によって決まる．例えば，体積が $V = L^3$ で周期的境界条件の場合は，

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\varepsilon e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}}, \qquad \boldsymbol{k} = \left(\frac{2\pi}{L}l, \frac{2\pi}{L}m, \frac{2\pi}{L}n\right) \tag{5.54}$$

9) 現在では，これら非局所相関は数十キロ離れてもなお存在することが実験的に確かめられている．例えば，W. Tittel, J. Brendel, B. Gisin, T. Herzog, H. Zbinden, and N. Gisin, Phys. Rev. A **57**, 3230 (1998).

$(l, m, n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots)$ である．ここで，$\boldsymbol{\varepsilon}$ は偏光ベクトルである．また，反射率が 100% の完全な鏡で囲まれた体積が $V = L^3$ の共振器の場合は，境界面で電場が 0 とならなければならないのでモード関数は，

$$\boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}) = \frac{8}{\sqrt{V}} \boldsymbol{\varepsilon} \sin k_x x \sin k_y y \sin k_z z, \qquad \boldsymbol{k} = \left(\frac{\pi}{L} l, \frac{\pi}{L} m, \frac{\pi}{L} n \right) \tag{5.55}$$

$(l, m, n = 1, 2, \cdots)$ で与えられる．

さて，N 個の原子の位置を $\boldsymbol{r}_j$ $(j = 1, 2, \cdots, N)$ とし，j 番目の原子の電気双極子モーメント演算子を $\hat{\boldsymbol{d}}_j$ とする．原子と電磁場が**電気双極子相互作用**をする場合，相互作用ハミルトニアンは，

$$\begin{aligned} \hat{V}_{\mathrm{ED}} &= -\sum_{j=1}^{N} \hat{\boldsymbol{d}}_j \cdot \hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r}_j) \\ &= -i \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2\epsilon_0}} \sum_{j=1}^{N} \left[\hat{a}\, \hat{\boldsymbol{d}}_j \cdot \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}_j) - \hat{a}^{\dagger}\, \hat{\boldsymbol{d}}_j \cdot \boldsymbol{u}^*(\boldsymbol{r}_j) \right] \end{aligned} \tag{5.56}$$

と書ける．2 準位原子の完全系は，$\{|\mathrm{u}\rangle, |\mathrm{d}\rangle\}$ なので，j 番目の原子の完全性条件

$$|\mathrm{u}\rangle_{jj}\langle \mathrm{u}| + |\mathrm{d}\rangle_{jj}\langle \mathrm{d}| = \hat{I}_j \tag{5.57}$$

($\hat{I}_j$ は j 番目の原子の状態に作用する 2 行 2 列の単位行列) を使うと，

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{d}}_j &= \hat{I}_j\, \hat{\boldsymbol{d}}_j \hat{I}_j \\ &= (|\mathrm{u}\rangle_{jj}\langle \mathrm{u}| + |\mathrm{d}\rangle_{jj}\langle \mathrm{d}|)\, \hat{\boldsymbol{d}}_j (|\mathrm{u}\rangle_{jj}\langle \mathrm{u}| + |\mathrm{d}\rangle_{jj}\langle \mathrm{d}|) \\ &= |\mathrm{u}\rangle_{jj}\langle \mathrm{u}|\, \hat{\boldsymbol{d}}_j |\mathrm{d}\rangle_{jj}\langle \mathrm{d}| + |\mathrm{d}\rangle_{jj}\langle \mathrm{d}|\, \hat{\boldsymbol{d}}_j |\mathrm{u}\rangle_{jj}\langle \mathrm{u}| \\ &= {}_j\langle \mathrm{u}|\, \hat{\boldsymbol{d}}_j |\mathrm{d}\rangle_j \hat{\sigma}_{j+} + {}_j\langle \mathrm{d}|\, \hat{\boldsymbol{d}}_j |\mathrm{u}\rangle_j \hat{\sigma}_{j-} \end{aligned} \tag{5.58}$$

が得られる．ここで，${}_j\langle \mathrm{u}|\, \hat{\boldsymbol{d}}_j |\mathrm{u}\rangle_j = {}_j\langle \mathrm{d}|\, \hat{\boldsymbol{d}}_j |\mathrm{d}\rangle_j = 0$ を使った．また，$|\mathrm{u}\rangle_{jj}\langle \mathrm{d}| = \hat{\sigma}_{j+}$, $|\mathrm{d}\rangle_{jj}\langle \mathrm{u}| = \hat{\sigma}_{j-}$ は，それぞれ j 番目の原子の昇演算子と降演算子である．

(5.58) を (5.56) へ代入して回転波近似 (すなわち，$\hat{a}\hat{\sigma}_{j-}$ と $\hat{a}^{\dagger}\hat{\sigma}_{j+}$ を含む項を無視する近似) を行うと，

$$\hat{V} = \sum_{j=1}^{N} (g_j \hat{a} \hat{\sigma}_{j+} + g_j^* \hat{a}^{\dagger} \hat{\sigma}_{j-}) \tag{5.59}$$

が得られる．ここで，

$$g_j = -i \sqrt{\frac{\hbar \omega}{2\epsilon_0}}\, {}_j\langle \mathrm{u}| \hat{\boldsymbol{d}}_j |\mathrm{d}\rangle_j \boldsymbol{u}(\boldsymbol{r}_j) \tag{5.60}$$

は**電気双極子相互作用**の行列要素である．

各原子の行列要素 g_j の絶対値が同じ場合は，多原子との相互作用の振舞いを集団的に取り扱うことが可能である．このような近似が当てはまる状況は，原子集団が電磁場の波長に比べて十分狭い領域に局在する場合や，原子が波長間隔ごとに周期的に配列している場合である．このとき，$g_j = |g_j|e^{i\phi_j} \equiv ge^{i\phi_j}/2$ とおき，**集団的スピン演算子**

$$\hat{S}_\pm \equiv \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N} e^{i\phi_j}\hat{\sigma}_{j\pm}, \qquad \hat{S}_z \equiv \frac{1}{2}\sum_{j=1}^{N}\hat{\sigma}_{jz} \tag{5.61}$$

を定義すると，これらはスピンの交換関係

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_\pm] = \pm\hat{S}_\pm, \qquad [\hat{S}_+, \hat{S}_-] = 2\hat{S}_z \tag{5.62}$$

を満足することがわかる．このとき，相互作用ハミルトニアン (5.59) は，

$$\hat{V} = \hbar g(\hat{a}\hat{S}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{S}_-) \tag{5.63}$$

となり，全系のハミルトニアンは，

$$\hat{H} = \hbar\omega\hat{S}_z + \hbar\omega_0\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar g(\hat{a}\hat{S}_+ + \hat{a}^\dagger\hat{S}_-) \tag{5.64}$$

で与えられる．このハミルトニアンで記述される模型は．**トラヴィス–カミングス模型**とよばれる[10]．スピンの大きさを S，その z 成分を S_z とすると，原子集団の量子状態は $|S, S_z\rangle$ と書ける．単一モードの電磁場の量子状態をフォック表示 $|n\rangle$ で表すと，全系の量子状態は各 S の値に対して，次のような基底を用いて記述することができる．

$$|S, S_z; n\rangle, \qquad (S_z = S, S-1, \cdots, -S,\ n = 0, 1, 2, \cdots). \tag{5.65}$$

初期状態として光子が存在しない場合を考えよう．このとき，相互作用ハミルトニアンの 0 でない行列要素は，

$$\langle S, S_z - 1; 1|\hat{V}|S, S_z; 0\rangle$$

である．これに (5.64) を代入して，関係式

$$\hat{S}_\pm|S, S_z\rangle = \sqrt{(S \mp S_z)(S \pm S_z + 1)}|S, S_z \pm 1\rangle \tag{5.66}$$

10) この模型は $\omega = \omega_0$ の場合は，トラヴィスとカミングスによって解かれた (M. Travis and F. W. Cummings, Phys. Rev. **170**, 379 (1968); **188**, 692 (1969))．また，$\omega \neq \omega_0$ の場合は，ヘップとリープによって解かれた (K. Hepp and E. H. Lieb, Ann. Phys. (N.Y.) **76**, 360 (1973)).

を使うと,

$$\langle S, S_z - 1; 1|\hat{V}|S, S_z; 0\rangle = \hbar g\sqrt{(S+S_z)(S-S_z+1)} \equiv A$$

が得られる．ここで，$S = N/2$ であり，原子集団が光子を放出する確率は $|A|^2$ に比例する．特に，$S_z = 0$ の場合，すなわち，半数の原子が励起されている場合は,

$$|A|^2 = (\hbar g)^2 S(S+1) \propto N(N+2)$$

となり，N 個の原子が独立に光子を放出する場合の確率 $\propto N$ に比べて光子の放出確率が増大する．これは，原子集団が (5.63) のように共通の電場場モードと相互作用する結果生じる**協力現象**であり，ディッケ (Dicke) の**超放射**とよばれる.

次に，N 個の 2 準位原子が n 個の光子と相互作用する場合を考えよう．原子は初めすべて下準位にあるとすると，原子集団を表すスピンの大きさは $S = N/2$ であり，初期状態は $|S, -S\rangle$ で与えられる．スピンの大きさは変わらないので，以下ではその z 成分のみで $|S_z\rangle$ のように書こう．したがって，初期状態は $|-S, n\rangle$ と書ける．相互作用ハミルトニアンは，S_z の値を 1 増加 (減少) させると同時に n の値を 1 減少 (増加) させるので，シュレーディンガー方程式 $\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ の固有状態として，次の形の解を仮定することができる.

$$|\Psi\rangle = \sum_{k=0}^{\min\{2S,n\}} \alpha_k |-S+k; n-k\rangle. \tag{5.67}$$

(5.64) と (5.66) から

$$\begin{aligned}\hat{H}|\Psi\rangle &= \sum_k \hbar\Big\{[-\omega(S-k) + \omega_0(n-k)]\alpha_k \\ &\quad + g\sqrt{k(n-k+1)(2S-k+1)}\alpha_{k-1} \\ &\quad + g\sqrt{(k+1)(n-k)(2S-k)}\alpha_{k+1}\Big\}|-S+k; n-k\rangle \\ &= E|\Psi\rangle\end{aligned} \tag{5.68}$$

が得られ，これから係数 α_k を決める次のような漸化式が得られる.

$$\begin{aligned}&[E + \hbar\omega(S-k) - \hbar\omega_0(n-k)]\alpha_k - \hbar g\sqrt{k(n-k+1)(2S-k+1)}\alpha_{k-1} \\ &\quad - \hbar g\sqrt{(k+1)(n-k)(2S-k)}\alpha_{k+1} = 0.\end{aligned} \tag{5.69}$$

特別な場合として，N 個の原子集団が光子 1 個 $(n=1)$ と相互作用する場合を考えよう．この場合は，$S=N/2$ であり，(5.67) で $k=0,1$ の場合のみを考えれば十分なので，(5.69) から

$$\begin{pmatrix} E+\hbar(\omega N/2-\omega_0) & -\hbar g\sqrt{N} \\ -\hbar g\sqrt{N} & E+\hbar\omega(N/2-1) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \end{pmatrix} = 0. \tag{5.70}$$

ゼロでない解 (α_0,α_1) が存在するためには，左辺の行列の行列式がゼロでなければならない．したがって，エネルギー固有値は次のように与えられる．

$$E=\frac{1}{2}\left\{\hbar\left[\omega+\omega_0-\frac{\omega N}{2}\right]\pm\hbar\sqrt{4g^2N+(\omega-\omega_0)^2}\right\}. \tag{5.71}$$

右辺の $-\hbar\omega N/2$ は，下準位の原子のエネルギーを $-\hbar\omega/2$ となるようにエネルギーの原点をとったことによる．これから，1 個の光子と N 個の下準位にある原子集団が相互作用する場合のラビ分裂は，

$$\Delta E=\hbar\sqrt{4g^2N+(\omega-\omega_0)^2} \tag{5.72}$$

で与えられる．特に，光子と原子のエネルギーが共鳴している $(\omega=\omega_0)$ 場合は，

$$\Delta E=2\hbar g\sqrt{N}$$

となり，分裂幅は原子数の平方根に比例して増大することがわかる．

5.8 自然放出のワイスコップ–ウィグナー理論

これまでの議論では，原子から放出される光子のエネルギーはある値に決まっていて揺らがないと仮定された．しかし，現実には原子のエネルギー準位はある幅をもっており，**自然線幅**とよばれている．その結果，原子から放出される光子もまた同様のエネルギー幅をもっている．自然線幅を与える最も本質的な物理は，原子が相互作用をする電磁場からの反作用である．微小共振器中では，原子と相互作用をする電磁場モードの数が極端に制限されるので自然幅も狭くなり，ジェインズ–カミングス模型がよい近似で成立する．ここでは，逆の極限として真空中に置かれた励起原子による光子の放出 —**自然放出**— を考察しよう．

ハミルトニアンは，(5.12) を原子が結合する電磁場のモードが多数存在する場合に拡張した

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{\sigma}_z + \hat{I}) + \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}} + \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\left(g_{\boldsymbol{k}}\hat{\sigma}_+\hat{a}_{\boldsymbol{k}} + g^*_{\boldsymbol{k}}\hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}\right) \tag{5.73}$$

を用いる．偏光の自由度は以下の議論では本質的ではないので無視する．ここで，$\hat{I}$ は 2 行 2 列の単位行列であり，下準位のエネルギーを 0 とするために導入した．状態ベクトルとしては，

$$|\Psi(t)\rangle = c_0(t)|\mathrm{u}, \mathrm{vac}\rangle + \sum_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}}(t)|\mathrm{d}, n_{\boldsymbol{k}} = 1\rangle \tag{5.74}$$

を仮定する．ここで，$|\mathrm{u}, \mathrm{vac}\rangle$ は原子は上準位で電磁場は真空状態であり，$|\mathrm{d}, n_{\boldsymbol{k}} = 1\rangle$ は原子は下準位で，電磁場は波数 $\boldsymbol{k}$ のモードに光子が 1 個存在し，他のモードは真空状態であることを意味するものとする．初期状態は，$c_0(0) = 1$, $c_{\boldsymbol{k}}(0) = 0$ である．(5.74) をシュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{5.75}$$

に代入して，各状態の係数を等しいとおくと，

$$\frac{d}{dt}c_0 = -i\omega c_0 - i\sum_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}}, \tag{5.76}$$

$$\frac{d}{dt}c_{\boldsymbol{k}} = -i\omega_{\boldsymbol{k}} c_{\boldsymbol{k}} - i g^*_{\boldsymbol{k}} c_0 \tag{5.77}$$

が得られる．(5.77) を $c_{\boldsymbol{k}}$ について解くと，

$$c_{\boldsymbol{k}}(t) = -i g^*_{\boldsymbol{k}} \int_0^t dt'\, c_0(t') e^{i\omega_{\boldsymbol{k}}(t'-t)}. \tag{5.78}$$

これを (5.76) に代入すると，

$$\frac{d}{dt}(c_0(t)e^{i\omega t}) = -\int_0^t dt'\,(c_0(t')e^{i\omega t'}) \sum_{\boldsymbol{k}} |g_{\boldsymbol{k}}|^2 e^{i(\omega_{\boldsymbol{k}}-\omega)(t'-t)}. \tag{5.79}$$

ここで，電磁場の状態密度が $\rho(\omega_{\boldsymbol{k}})$ に従って分布していると仮定し，$g_{\boldsymbol{k}}$ を $g(\omega_{\boldsymbol{k}})$ で置き換えて右辺の和を次のように積分形で書くと，

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{k}} |g_{\boldsymbol{k}}|^2 e^{i(\omega_{\boldsymbol{k}}-\omega)(t'-t)} &= \int d\omega_{\boldsymbol{k}}\, \rho(\omega_{\boldsymbol{k}})|g(\omega_{\boldsymbol{k}})|^2 e^{i(\omega_{\boldsymbol{k}}-\omega)(t'-t)} \\ &\simeq \Gamma\delta(t'-t).\end{aligned} \tag{5.80}$$

右辺の最後の等式では，$\rho(\omega_{\boldsymbol{k}})|g(\omega_{\boldsymbol{k}})|^2$ が原子の共鳴周波数 ω_{a} 付近で一定の値をとるものと仮定して，定数

$$\Gamma \equiv 2\pi\rho(\omega_{\mathrm{a}})|g(\omega_{\mathrm{a}})|^2 \tag{5.81}$$

に置き換えることで得られる．(5.80) を (5.79) に代入すると，

$$\frac{d}{dt}(c_0(t)e^{i\omega t}) = -\frac{\Gamma}{2}(c_0(t)e^{i\omega t}). \tag{5.82}$$

すなわち，

$$c_0(t) = e^{-i\omega t - \frac{\Gamma}{2}t}. \tag{5.83}$$

こうして，真空中に置かれた励起原子が時間 t 後も励起状態に留まりつづける確率は，$|c_0(t)|^2 = e^{-\Gamma t}$ のように指数関数的に減衰する．減衰率 Γ は (5.81) から明らかなように，原子の共鳴周波数における電磁場モードの密度 $\rho(\omega_{\mathrm{a}})$ と相互作用の強さを特徴づける係数 $|g(\omega_{\mathrm{a}})|^2$ に比例する．減衰率の逆数は励起準位の**寿命** τ とよばれる．

$$\tau = \frac{1}{\Gamma}. \tag{5.84}$$

励起状態にある原子は τ 程度の時間で光子を放出するので，エネルギーと時間の不確定性関係から光子のエネルギーは $\hbar/\tau = \hbar\Gamma$ 程度揺らぐ．

自然放出のプロセスは，(5.83) からわかるように非可逆である．その理由は，真空中の電磁場モードが連続的に分布しているからである．逆に，原子と相互作用できる電磁場モードが 1 つしかない場合は，$\rho(\omega_{\boldsymbol{k}}) = 2\pi\rho_0\delta(\omega_{\boldsymbol{k}} - \omega)$ とおくと，

$$\begin{aligned}\sum_{\boldsymbol{k}} |g_{\boldsymbol{k}}|^2 e^{i(\omega_{\boldsymbol{k}}-\omega)(t'-t)} &= \int d\omega_{\boldsymbol{k}}\, \rho(\omega_{\boldsymbol{k}})|g(\omega_{\boldsymbol{k}})|^2 e^{i(\omega_{\boldsymbol{k}}-\omega)(t'-t)} \\ &= 2\pi\rho_0|g(\omega)|^2 \equiv \Omega^2.\end{aligned} \tag{5.85}$$

これを (5.79) に代入して，それを初期状態 $c_0(0) = 1$ で解くと，

$$c_0(t) = e^{-i\omega t}\cos\Omega t \tag{5.86}$$

が得られ，自然放出は可逆となる．これは 5.2 節で述べたラビ振動に他ならない．

5.9 共振器量子電気力学

共振器量子電気力学 (cavity quantum electrodynamics，略して，cavity QED とよばれる) は，微小な共振器に閉じ込められた電磁場と原子との相互作用を

研究する学問をいう．通常の量子電気力学は，真空中や一様媒質中での原子と電磁場との相互作用を考えるので，電磁場の状態密度は連続的に分布する．これに対して，微小共振器中では，状態密度の離散性が顕著となり，原子と実効的に相互作用をする電磁場モードの数が極端に減少する．その結果，電磁場と相互作用をする原子の諸性質，とりわけ，自然放出寿命が大きく変化する．反射率が極めて高い鏡で囲まれた微小共振器中では，後述するようにそこに含まれる光子の数を 0 個または 1 個と制限することができ，そのような光子状態と 2 準位原子を相互作用させると，原子と光子がもつれた状態をつくることができる．これを利用することによって，量子力学の基礎の検証や量子情報に関する研究を行うことができる．

長さが L の 1 次元共振器に閉じ込められた電磁場を考えよう．反射率が 100%の理想的な共振器では，電磁場の振幅が壁のところで 0 にならなければならない．このとき，電磁場の波数 k は，

$$\sin kL = 0 \longrightarrow k = \frac{\pi}{L}n \quad (n = 1, 2, \cdots) \tag{5.87}$$

のようにとびとびの値しかとれない．したがって，原子をこのような共振器に閉じ込めると，原子の共鳴周波数 ω が条件

$$\omega = ck = \frac{\pi c}{L}n \tag{5.88}$$

(c は光速度) を満足しないかぎり，原子は電磁場と相互作用できず，したがって，自然放出も禁止される．この原理を用いて，自然放出を増強あるいは抑圧することができる[11)]．レーザーを発振させるためには，あるしきい値以上の電流を流す必要があるが，そのおもな原因は自然放出によるエネルギーのロスである．自然放出を抑圧することによりレーザー発振のしきい値を下げることができる．

2 準位原子と電磁場との相互作用を考える．電磁場は共振器によって離散化されており，原子と実効的に相互作用するモードは 1 つであると仮定しよう．このとき，原子と電磁場との相互作用は，ジェインズ–カミングス・ハミルトニアン

---

11) 超伝導からなるマイクロ波共振器を用いて原子の自然放出を抑圧した実験は，次の論文で報告されている．R. G. Hulet, E. S. Hilfer, and D. Kleppner, Phys. Rev. Lett. **55**, 2137 (1985).

$$\hat{H}_{\rm JC} = \frac{1}{2}\hbar\omega\hat{\sigma}_z + \hbar\omega_0\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar g\left(\hat{\sigma}_+\hat{a} + \hat{\sigma}_-\hat{a}^\dagger\right) \tag{5.89}$$

によって記述されることはすでに述べた．超伝導共振器中での**リドベリー原子**の場合，典型的なパラメーターの値は次のとおりである．

- $\omega_0, \omega \sim 10 - 100$ GHz　(リドベリー原子).
- $|\delta| \equiv |\omega_0 - \omega| \sim$ kHz–MHz　(離調周波数).
- $g \sim 10 - 100$ kHz　(ラビ振動数).

離調周波数がゼロ ($\delta = 0$) の場合，(5.50) からラビ振動数が原子と共振器モードが光子を吸収・放出をくり返すレートを表していることがわかる．また，真空中で起こる連続モードへの自然放出が (5.83) のように非可逆過程であるのに対して，理想的な共振器中で起こるラビ振動は，(5.86) のように原子と電磁場の間の可逆なエネルギーのやり取りである．

現実の系では，原子が双極子緩和を起こして光子が別なモードに逃げて行ってしまう時間 $t_{\rm dipole} \equiv 1/\kappa_{\rm dipole}$ や，共振器の鏡から光子が外へ逃げて行ってしまう時間 $t_{\rm cavity} \equiv 1/\kappa_{\rm cavity}$ が存在する．これらの時間が長いほど系は理想的な状況に近い．リドベリー原子の場合，原子の角運動量が最大の状態[12)]が $t_{\rm dipole}$ が最も長く 10^{-2} 秒程度になる．$\kappa_{\rm cavity}$ は，**Q 値**とよばれる因子と $\kappa_{\rm cavity} = \omega/Q$ なる関係で結ばれている．Q 値は共振器が理想的であるほど大きな値をとるが，超伝導共振器の場合は，とりわけ高く $10^8 - 10^{10}$ となる．$\omega \sim 10^{10} - 10^{11}$Hz なので，$t_{\rm cavity} = Q/\omega \sim 10^{-1} - 10^{-3}$ 秒となる．したがって，$\kappa_{\rm cavity} = 10 - 10^3$Hz となり，リドベリー原子の場合は，強結合条件

$$g \gg \kappa_{\rm dipole}, \kappa_{\rm cavity} \tag{5.90}$$

が成立しうることがわかる．これは，光子が共振器から出て行くまでに原子と光子がラビ振動を多数回くり返すことができることを意味している．

---

12) これを circular 状態という．circular リドベリー原子とは，1 つの電子が非常に高い励起状態 (主量子数 $n \simeq 50$) にあり，しかもその角運動量が最大値 $l = m = n - 1$ をとっている原子をいう．そのような電子の波動関数は，半径がおよそ $a_{\rm B}n^2$ であり，$ea_{\rm B}n^2/2$ 程度の大きな電気双極子モーメントをもっている．$n = 50$ の状態は，$n = 1$ の状態の 2500 倍もの双極子モーメントをもっており，そのおかげで条件 (5.90) が満足されている．角運動量が最大の状態は，電子の軌道が円であるので，(軌道が楕円となる) より小さな l や m をもつ状態に比べて放射寿命が長い (加速度が小さいから)．$n = 50$ の場合，寿命は約 30 ms である．秒速 300 m の熱原子が，30 cm 程度の実験系を通過するのに必要な時間は 1 ms であるから，双極子緩和が無視できる．

図 5.3 (a) のように，上準位 $|\mathrm{u}\rangle$ に励起された 2 準位原子を次々と共振器に注入し，共振器から出て来た原子の状態を 1 個ずつ測定することにより，共振器に光子数状態をつくることができる[13]．微小共振器に上準位に励起された原子を次々と注入して，共振器から出て来た原子の状態が，上準位 $|\mathrm{u}\rangle$ か下準位 $|\mathrm{d}\rangle$ かを測定する．原子の状態が $|\mathrm{u}\rangle$ ($|\mathrm{d}\rangle$) であれば，共振器内の光子数は変化しない (1 個増える)．このように，共振器から出て来る原子の状態を測定することによって，共振器内の状態はいろいろな光子数状態へと変化する．

いま，このような操作によって共振器内に光子が n 個存在することがわかっている場合に，新たに上準位にある原子を注入すると，どんなことが起こるだろうか．原子が共振器を通過した後の状態は，(5.24) より

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}\left[\cos(g\sqrt{n+1}t)|\mathrm{u}, n\rangle - i\,\sin(g\sqrt{n+1}t)|\mathrm{d}, n+1\rangle\right] \tag{5.91}$$

で与えられる．ここで，t は原子が共振器を通過する時間である．さて，共振器の光子の損失が無視できる場合は，励起された原子を次々と注入することにより，共振器中の光子数は原理的には無限大になりうる．しかし，共振器中の光子数 n_0 が条件

$$\sqrt{n_0+1}gt = k\pi \qquad (k\text{ は整数}) \tag{5.92}$$

を満たせば，(5.91) より $|\Psi(t)\rangle = e^{-i(n+\frac{1}{2})\omega t}(-1)^k|\mathrm{u}, n_0\rangle$ となり，光子数はそれ以上増加せず光子数状態 $|n_0\rangle$ が実現する．このような状態は**トラップ状態**とよばれる[14]．トラップ状態は，共振器を通過する原子の速度 (したがって，相互作用時間 t) を調節することにより原理的には実現可能である．しかし，現実には，光子損失や共振器からの黒体輻射，および原子の検出感度の不完全さなどを克服する必要がある．

13) D. Meschede, H. Walther, and G. Muller, Phys. Rev. Lett. **54**, 551 (1985).

14) P. Filipowicz, J. Javanainen, and P. Meystre, J. Opt. Soc. Am. B **3**, 906 (1986); P. Meystre, G. Rempe, and H. Walther, Opt. Lett. **13**, 1078 (1988).

6. 巨視的量子現象

—— ボース–アインシュタイン凝縮と超流動 ——

シンプルで美しいミクロな基礎法則からマクロな世界の多様性と普遍性がどのように導かれるのか．計算機の能力が向上すれば，シュレーディンガー方程式を解くだけですべての現象が理解できるという考えには，おそらく致命的な欠陥がある．仮に，計算機でアボガドロ数の原子からなる系のシュレーディンガー方程式が解けたとしても，アウトプットされる莫大な量の数値データを見るだけでは，我々は現象を理解することはできない．そこから現象の本質の理解につながる物理量を取り出すためには，自然に対する深い洞察が要求される．

現実には，ミクロからマクロへと至る道筋は決して平坦ではなくさまざまな**階層構造**が存在し，各階層はそれぞれ独自の法則に従っている．巨視的量子現象を理解する出発点は，それを記述する**平均場**を発見することである．平均場は，**秩序パラメーター**ともよばれる．以下で述べる**ボース–アインシュタイン凝縮** (<u>B</u>ose-<u>E</u>instein <u>c</u>ondensation，略して BEC) は，超流動や超伝導を引き起こす基本的なメカニズムであり，それと同時にこれらの状態を記述する秩序パラメーターを生み出す．レーザー光は莫大な数の光子が同じ量子状態 (すなわち，同じ波数と偏光ベクトル) にボース–アインシュタイン凝縮する結果，月までも広がらずに進む．本章では，ミクロな量子効果がマクロなレベルへと増幅されるメカニズム，超流動などの巨視的量子現象，および関連するシュレーディンガーの猫のパラドックスなどについて述べる．

6.1 素粒子と複合粒子の統計性

素粒子は，スピンの大きさが $\hbar$ の整数倍 ($0,\ \hbar,\ 2\hbar, \cdots$) か半整数倍 ($\frac{\hbar}{2},\ \frac{3}{2}\hbar,\ \frac{5}{2}\hbar, \cdots$) かによって，**ボース粒子**と**フェルミ粒子**に大別される．電子，陽子，中性子のスピンはいずれも $\frac{\hbar}{2}$ なのでフェルミ粒子である．これに対して，光子はスピンが $\hbar$ なのでボース粒子である．

ボース粒子は同じ量子状態を任意の個数の粒子が占めることができるという**ボース–アインシュタイン統計**に従う．これに対して，フェルミ粒子は同じ量子状態を最大 1 個までしか占めることができない．これを**パウリの排他原理**という．フェルミ粒子が従う統計は**フェルミ–ディラック統計**とよばれる．

複数の素粒子からなる**複合粒子**の統計性も，そのスピンの大きさが $\hbar$ の整数倍か半整数倍かによって，それぞれボース–アインシュタイン統計かフェルミ–ディラック統計に従う．それゆえ，偶数個のフェルミ粒子からなる複合粒子はボース粒子であり，奇数個のフェルミ粒子からなる複合粒子はフェルミ粒子である．特に，電気的に中性の粒子では，陽子の数と電子の数は等しいので，統計性はそれに含まれる中性子の数の偶奇性で決まる．複合粒子の統計性の具体例を表 6.1 に示す．

表 6.1 複合粒子の統計性

複合粒子	構成要素			統計性
^{1}H	陽子 1	中性子 0	電子 1	ボース粒子
^{2}D (重水素)	陽子 1	中性子 1	電子 1	フェルミ粒子
^{3}He	陽子 2	中性子 1	電子 2	フェルミ粒子
^{4}He	陽子 2	中性子 2	電子 2	ボース粒子

中性子の数だけが異なる同位体 (^{1}H と ^{2}D，^{3}He と ^{4}He，^{6}Li と ^{7}Li など) は，室温ではすべて古典統計 (**マクスウェル–ボルツマン統計**) に従い，化学的には同じ性質を示す (化学的性質は原子中の電子の配置によって決まる)．しかし，低温になると，一方はボース–アインシュタイン統計，他方はフェルミ–ディラック統計に従い，全く異なった性質を示すようになる．

ところで，複合粒子は低温になると，完全なボース粒子あるいはフェルミ粒子として振舞い，その内部構造は表に現れないのだろうか？　複合粒子の内部構造は，それを構成する粒子系の励起状態の性質として現れる．簡単のため

に，複合粒子の構成要素が半径 r の領域に閉じ込められているとしよう．このとき，内部に閉じ込められた粒子の励起エネルギーは，

$$E^{\mathrm{ex}} \sim \frac{\hbar^2}{mr^2} \tag{6.1}$$

程度である (井戸型ポテンシャルを考えよ)．したがって，系をプローブするために加えられる外部摂動のエネルギー ϵ や系の温度 T が，条件

$$\epsilon,\ k_{\mathrm{B}}T \ll E^{\mathrm{ex}} \tag{6.2}$$

を満足するくらい十分に小さければ，系は励起されず複合粒子の内部構造は表に現れない．逆に，この条件が満足されない場合は，内部構造が系の性質に影響を与える．

6.2 同種粒子の識別不可能性の原理

巨視的な量子効果が発現するうえで本質的な役割をするのは，**同種粒子の識別不可能性の原理**である．この原理の意味を理解するために，系のとりうる状態として 2 つの箱を考え，これに 2 個の粒子を分配する場合の数を考えよう．古典論では，たとえ 2 個の粒子が同種粒子であっても識別することができる．その理由は，古典論では粒子の位置と運動量が同時に確定した値がとれるので，その軌道を時々刻々追跡することが原理的には可能だからである．粒子の詰め方は，(1) 箱 1 に 2 粒子，(2) 箱 2 に 2 粒子，(3) 箱 1 に粒子 A，箱 2 に粒子 B，(4) 箱 1 に粒子 B，箱 2 に粒子 A を詰める 4 通りある．それぞれの場合が同じ確率で起こるものと仮定すると，箱 1 に両方の粒子が見出される確率は 1/4 となる．

量子論では，不確定性原理のために粒子の軌道というものを考えることができない．それゆえ，もしスピンなどの内部状態も同じならば，同種粒子を識別できる物理量が原理的に存在しない．したがって，ボース粒子の場合は，上記の (3) と (4) は，同じ状態とみなされるので，箱 1 に両方の粒子が見出される確率は 1/4 から 1/3 に増加する．他方，フェルミ粒子の場合は，パウリの排他原理のために同じ箱に 2 個の粒子が見出される確率は 0 となる．このように，古典粒子に比べてボース粒子はお互いに集まろうとする傾向があるのに対して，フェルミ粒子はお互いを避けようとする傾向がある．前者を**バンチング**

効果，後者を**アンチバンチング効果**という．注目すべきことは，このような傾向が粒子間の相互作用のために起こったわけではなく，ボース粒子とフェルミ粒子の違いという量子統計性のために起こったことである．さらに，いずれの場合も，系がとりうる状態の数は古典論の場合に比べて少なくなる (上の例では，ボース粒子系の場合は 4 通りから 3 通りへ，フェルミ粒子系の場合は 1 通りへ減少する)．これは，同種粒子が識別できないために多粒子系がとりうる状態の数が減少するからである．

同種粒子系がとりうる状態の数が古典論の場合に比べて少なくなるという事実は，数学的には粒子を識別するラベル (位置や運動量など) に関して，波動関数をボース粒子系の場合は**対称化**，フェルミ粒子系の場合は**反対称化**しなければならないという要請に現れる．このことを理解するために，2 粒子系を考え，その状態を特徴づけるラベルを ξ_1, ξ_2，全系の波動関数を $\Psi(\xi_1,\xi_2)$ と書こう．同種粒子の識別不可能性の原理より，粒子 1 と 2 を入れ替えて得られる波動関数 $\Psi(\xi_2,\xi_1)$ は，もとの波動関数 $\Psi(\xi_1,\xi_2)$ と同じ状態を記述していなければならない．これは両者が定数の位相因子 $e^{i\alpha}$ を除いて等しいことを意味している．

$$\Psi(\xi_1,\xi_2) = e^{i\alpha}\Psi(\xi_2,\xi_1). \tag{6.3}$$

再度粒子の入れ替えを行うと，

$$\Psi(\xi_2,\xi_1) = e^{i\alpha}\Psi(\xi_1,\xi_2). \tag{6.4}$$

これらから $e^{2i\alpha} = 1$ が得られる．よって，$e^{i\alpha} = \pm 1$ となるので，

$$\Psi(\xi_1,\xi_2) = \pm\Psi(\xi_2,\xi_1) \tag{6.5}$$

でなければならないことがわかる．

一般に，シュレーディンガー方程式を解いて得られる波動関数 $\Phi(\xi_1,\xi_2)$ は，そのままでは条件 (6.5) を満足しない．(6.5) を満足させるためには，波動関数を

$$\Psi(\xi_1,\xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\Phi(\xi_1,\xi_2) \pm \Phi(\xi_2,\xi_1)]$$

のように対称化 (プラス符号) あるいは反対称化 (マイナス符号) しなければならない．ここで，前者はボース粒子系，後者はフェルミ粒子系の場合に対応している．2 粒子を状態 ξ_1 と ξ_2 に見出す確率は，

$$|\Psi(\xi_1,\xi_2)|^2 = \frac{1}{2}\Big[|\Phi(\xi_1,\xi_2)|^2 + |\Phi(\xi_2,\xi_1)|^2$$

$$\pm \Phi^*(\xi_1, \xi_2)\Phi(\xi_2, \xi_1) \pm \Phi(\xi_1, \xi_2)\Phi^*(\xi_2, \xi_1)\Big]$$

となる．右辺の最初の 2 項は**対角項**，残りは**非対角項** (干渉項) とよばれる．これから，2 粒子を同じ状態 $(\xi_1 = \xi_2)$ に見出す確率は，非対角項が存在しない古典的な場合と比較して，ボース粒子の場合は 2 倍になり，フェルミ粒子の場合は 0 となることがわかる．後者はパウリの排他原理に他ならない．この干渉効果は，2 粒子の確率振幅の干渉効果であるという点で，1 粒子の確率振幅の干渉効果であるヤングの干渉と異なっている．

次に，同種粒子が N 個存在する場合を考えよう．この場合，N 粒子の確率振幅が干渉する．ボース (フェルミ) 粒子系では，任意の 2 粒子の入れ替えに対して，波動関数は対称 (反対称) でなければならない．N 粒子系のシュレーディンガー方程式の解 $\Phi(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N)$ が与えられた場合，対称化された波動関数は，

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} \Phi(\xi_{\sigma(1)}, \xi_{\sigma(2)}, \cdots, \xi_{\sigma(N)}) \tag{6.6}$$

で与えられ，反対称化された波動関数は，

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \cdots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\sigma} \mathrm{sgn}(\sigma) \Phi(\xi_{\sigma(1)}, \xi_{\sigma(2)}, \cdots, \xi_{\sigma(N)}) \tag{6.7}$$

で与えられる．ここで，σ についての和は，$1, 2, \cdots, N$ を $\sigma(1), \sigma(2), \cdots, \sigma(N)$ へと置換する $N!$ 通りの和をとるものとする．また，$\mathrm{sgn}(\sigma)$ は，σ が偶置換のときは $+1$，奇置換のときは -1 をとる符号関数である．一般に，2 粒子の置換が偶数回必要な置換を偶置換，奇数回必要な置換を奇置換という．例えば，1, 2, 3 を 1, 3, 2 へ置換するためには，2 と 3 の置換 (2, 3) を 1 回行うだけでよいので，$\mathrm{sgn}\,(\sigma) = -1$ である．これに対して，1, 2, 3 を 2, 3, 1 へ置換するためには，2 粒子の置換を 2 回 (1, 2) (2, 3) 行う必要があるので，$\mathrm{sgn}\,(\sigma) = 1$ である．フェルミ粒子の場合は，2 個の粒子を入れ替えるごとにマイナスの符号がつくので，奇置換に対してはマイナス符号をつけなければならない．

(6.6) の両辺の絶対値の 2 乗をとると，右辺に含まれる項のうち対角項の数が $N!$ 個なのに対して，非対角項の数は $N!(N!-1)$ 個ある．$\xi_1 = \xi_2 = \cdots = \xi_N \equiv \xi$ とおくと，これらすべての非対角項が対角項と同程度の寄与をするので，

$$|\Psi(\xi, \xi, \cdots, \xi)|^2 = N! |\Phi(\xi, \xi, \cdots, \xi)|^2 \tag{6.8}$$

となり，N 個の粒子が同じ状態 ξ に見出される確率は，非対角項が存在しない古典的な場合に比べて $N!$ 倍になる．この効果は粒子数が巨視的な場合は，状態に巨大な変化をもたらし，次に述べるボース–アインシュタイン凝縮とよばれる相転移を引き起こす．

6.3 理想気体のボース–アインシュタイン凝縮

ボース–アインシュタイン凝縮 (BEC) は，通常は巨視的な数の粒子がある温度以下で最もエネルギーの低い 1 粒子状態を占める相転移をいう．しかし，以下に述べる BEC の本質を考えると，巨視的な数の粒子が最低エネルギーでない同じ 1 粒子状態を占める現象も広い意味で BEC であるといえる．レーザー光はそのような広義の BEC の典型例である．

まず，理想ボース気体の BEC について議論する．理想ボース粒子系の**大分配関数**は，

$$\Xi = \prod_{\boldsymbol{k}} \sum_{n_{\boldsymbol{k}}=0}^{\infty} (e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})})^{n_{\boldsymbol{k}}}, \qquad \beta \equiv (k_{\mathrm{B}}T)^{-1} \tag{6.9}$$

で与えられる．ここで，$\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \hbar^2 \boldsymbol{k}^2/2m$ は波数 $\boldsymbol{k}$ の粒子のエネルギー，μ は化学ポテンシャルである．右辺の幾何級数が収束するためには $e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})} < 1$ でなければならない．一様な系の理想気体の最低エネルギーは $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = 0$ なので，$\mu \leq 0$ でなければならない．このとき，(6.9) は収束し

$$\Xi = \prod_{\boldsymbol{k}} (1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})})^{-1} \tag{6.10}$$

となる．**熱力学的ポテンシャル**は，

$$\Omega \equiv -\beta^{-1} \ln \Xi = \beta^{-1} \ln(1 - e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})}) \tag{6.11}$$

で与えられる．これから，波数 $\boldsymbol{k}$ の量子状態を占める粒子数の期待値は，

$$\bar{n}_{\boldsymbol{k}} = -\frac{\partial \Omega_{\boldsymbol{k}}}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu)} - 1} \tag{6.12}$$

で与えられる．

化学ポテンシャル μ は，ボース粒子の総数の期待値が N に等しいという条件

$$N = \sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu)} - 1} \tag{6.13}$$

から決められる．右辺の和は公式

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \to \frac{gV}{(2\pi)^D} \int d^D k \tag{6.14}$$

に従って積分に置き換えることができる．ここで，V は系の体積，D は空間の次元，g はスピン縮退度とよばれる量で，スピンの大きさが S の場合 $g = 2S+1$ で与えられる．3 次元空間 $(D = 3)$ の場合は，(6.13) は次のように書き換えられる．

$$\frac{N}{V} = \frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3 k \, \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)} - 1}. \tag{6.15}$$

ここで，粒子数密度 N/V を一定にしつつ温度を下げていくとどうなるかを考えよう．このとき，右辺の温度依存性のために，化学ポテンシャルは温度が下がると増大しなければならない．

$\mu \leq 0$ なので (6.15) の右辺が最大となるのは，$\mu = 0$ の場合である．このときの温度を T_0 とすると，

$$\frac{N}{V} = \frac{g(mk_{\mathrm{B}}T_0)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} \, dx = g\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_{\mathrm{B}}T_0}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}. \tag{6.16}$$

となる．T_0 は**転移温度**とよばれる．ここで，積分公式

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} \, dx = \Gamma\left(\frac{3}{2}\right)\zeta\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot 2.612 \tag{6.17}$$

を使った．(6.16) を温度について解くと，次の結果が得られる．

$$k_{\mathrm{B}}T_0 = \frac{2\pi}{\left(g\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\right)^{\frac{2}{3}}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{3.31}{g^{\frac{2}{3}}} \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V}\right)^{\frac{2}{3}}. \tag{6.18}$$

T_0 より低温側では化学ポテンシャルは 0 なので，(6.15) の右辺の計算結果は，(6.16) の右辺で T_0 を T で置き換えたものに等しくなる．

$$\frac{g}{(2\pi)^3} \int d^3 k \, \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\boldsymbol{k}}} - 1} = g\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{mk_{\mathrm{B}}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}. \tag{6.19}$$

しかし，これは $T < T_0$ で N/V よりも小さくなってしまう．実は，$T < T_0$ では，(6.19) は正のエネルギー $(\epsilon_{\boldsymbol{k}} > 0)$ をもった粒子に対してのみ正しい．なぜならば，エネルギーが 0 の粒子は，(6.16) の被積分関数の因子 $\sqrt{x}$ のために積分に寄与できないからである．したがって，$T < T_0$ では，エネルギーが 0 の

粒子数 N_0 を積分から分離する必要がある．$\epsilon > 0$ の寄与は，(6.18) を (6.19) に代入することにより

$$\frac{N_{\epsilon>0}}{N} = \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{6.20}$$

と書けることに注意すると，$\epsilon = 0$ の成分は次のように書ける．

$$\frac{N_{\epsilon=0}}{N} = 1 - \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \qquad (T < T_0). \tag{6.21}$$

このように，転移温度 T_0 以下で巨視的な数の粒子が同じ 1 粒子状態 (いまの場合は $\epsilon = 0$ なる状態) を占める現象をボース–アインシュタイン凝縮という．

BEC が他の相転移と異なるのは，相互作用の助けを借りずに凝縮が起こるという点である．前節の最後で述べたように，同種粒子が同じ状態を占める確率は，多粒子の干渉効果により粒子数 N が大きくなると急激に増大し ((6.8) 参照)，N が巨視的な場合は系に著しい変化をもたらす．絶対零度ですべての粒子が最低エネルギー状態を占めるのは不思議ではないが，相互作用なしに巨視的な数の粒子が，ある温度で突然 1 粒子状態を占めるようになるのは尋常ではない．アインシュタインは，この現象を「引力なしの凝縮」とよんでいる．BEC は粒子間の相互作用を必要としないという意味で，純粋に量子統計的な相転移であるといえる[1]．

6.4 密度行列

空間の場所 $\boldsymbol{x}$ において，粒子を生成あるいは消滅させる演算子を**場の演算子**といい，それぞれ $\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$, $\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ と書く．場の演算子は，波数が $\boldsymbol{k}$ の粒子の生成・消滅演算子 $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger$，$\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$ を用いて，次のようにフーリエ展開できる (V は空間の体積)．

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}, \qquad \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}. \tag{6.22}$$

考えている粒子がボース粒子の場合は，生成・消滅演算子が従う正準交換関係

$$[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^\dagger] = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}, \qquad [\hat{a}_{\boldsymbol{k}}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}'}] = 0, \qquad [\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger, \hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^\dagger] = 0 \tag{6.23}$$

---

1) アインシュタインが BEC を予言したのは，ボース統計とフェルミ統計の違いが認識される以前である．しかし，彼は，同種粒子の識別不可能性を要請することにより，粒子が互いに影響を及ぼしあうことを指摘しており，彼の洞察の底知れない深さが感じられる．

から場の演算子の交換関係

$$\left.\begin{aligned}[\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{y})] &= \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}),\\ [\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}(\boldsymbol{y})] &= 0,\\ [\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{y})] &= 0\end{aligned}\right\} \tag{6.24}$$

が導かれる．例えば，最初の等式は次のように導かれる．

$$\begin{aligned}[\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{y})] &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'}]e^{i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{k}'\boldsymbol{y})} = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}\\ &= \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}).\end{aligned} \tag{6.25}$$

他の等式も同様に証明できる．フェルミ粒子系の場合は，**反交換子**を $\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$ で定義すると，(6.23) に対応する反交換関係

$$\{\hat{a}_{\boldsymbol{k}}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}, \qquad \{\hat{a}_{\boldsymbol{k}}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}'}\} = 0, \qquad \{\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}, \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}'}\} = 0 \tag{6.26}$$

から場の演算子が従う反交換関係

$$\left.\begin{aligned}\{\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{y})\} &= \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}),\\ \{\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}(\boldsymbol{y})\} &= 0,\\ \{\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{y})\} &= 0\end{aligned}\right\} \tag{6.27}$$

が導かれる．

波数 $\boldsymbol{k}$ の粒子が 1 個存在する状態 $|1_{\boldsymbol{k}}\rangle$ は，真空状態 $|\mathrm{vac}\rangle$ に生成演算子を作用させることによってつくられる．

$$|1_{\boldsymbol{k}}\rangle = \hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}|\mathrm{vac}\rangle. \tag{6.28}$$

これをフーリエ変換することにより，空間の位置 $\boldsymbol{x}$ に粒子が 1 個存在する状態 $|\boldsymbol{x}\rangle$ を構成することができる．

$$|\boldsymbol{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}|1_{\boldsymbol{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}}\hat{a}^\dagger_{\boldsymbol{k}}|\mathrm{vac}\rangle. \tag{6.29}$$

これを (6.22) と比較すると，

$$|\boldsymbol{x}\rangle = \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})|\mathrm{vac}\rangle \tag{6.30}$$

であることがわかる．異なる $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}'$ に対する状態 $|\boldsymbol{x}\rangle$ と $|\boldsymbol{x}'\rangle$ は直交している．実際，(6.22) より

$$\langle \boldsymbol{x}|\boldsymbol{x}'\rangle = \langle \mathrm{vac}|\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})|\mathrm{vac}\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} = \delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'). \tag{6.31}$$

このように，場の演算子 $\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ は位置 $\boldsymbol{x}$ に局在した粒子を生成する演算子である．同様に，$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})$ は位置 $\boldsymbol{x}$ に局在した粒子を消滅させる演算子である．

位置 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N$ に局在した N 粒子系の状態ベクトルを

$$|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N!}}\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}_1)\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}_2)\cdots\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}_N)|\mathrm{vac}\rangle \tag{6.32}$$

で定義する．正規直交条件は，ボース粒子系の場合は，

$$\begin{aligned}&\langle \boldsymbol{x}_1', \boldsymbol{x}_2', \cdots, \boldsymbol{x}_N'|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\rangle \\ &\quad = \frac{1}{N!}\sum_\sigma \delta(\boldsymbol{x}_1' - \boldsymbol{x}_{\sigma(1)})\delta(\boldsymbol{x}_2' - \boldsymbol{x}_{\sigma(2)})\cdots\delta(\boldsymbol{x}_N' - \boldsymbol{x}_{\sigma(N)})\end{aligned} \tag{6.33}$$

であり，フェルミ粒子系の場合は，

$$\begin{aligned}&\langle \boldsymbol{x}_1', \boldsymbol{x}_2', \cdots, \boldsymbol{x}_N'|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N\rangle \\ &\quad = \frac{1}{N!}\sum_\sigma \mathrm{sgn}(\sigma)\delta(\boldsymbol{x}_1' - \boldsymbol{x}_{\sigma(1)})\delta(\boldsymbol{x}_2' - \boldsymbol{x}_{\sigma(2)})\cdots\delta(\boldsymbol{x}_N' - \boldsymbol{x}_{\sigma(N)})\end{aligned} \tag{6.34}$$

で与えられる．ここで，σ は (6.6) と同じ置換演算子である．ここでは，$N=2$ の場合について証明を行い，一般の証明は読者にゆだねる．$\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})|\mathrm{vac}\rangle = 0$ であることと場の演算子の (反) 交換関係 (6.24) [(6.27)] を使うと，

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{x}_1', \boldsymbol{x}_2'|\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2\rangle &= \frac{1}{2}\langle \mathrm{vac}|\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}_2')\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}_1')\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_2)|\mathrm{vac}\rangle \\ &= \frac{1}{2}\langle \mathrm{vac}|\hat{\Psi}(\boldsymbol{x}_2')[\delta(\boldsymbol{x}_1' - \boldsymbol{x}_1)\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_2) \pm \delta(\boldsymbol{x}_1' - \boldsymbol{x}_2)\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x}_1)]|\mathrm{vac}\rangle \\ &= \frac{1}{2}[\delta(\boldsymbol{x}_1' - \boldsymbol{x}_1)\delta(\boldsymbol{x}_2' - \boldsymbol{x}_2) \pm \delta(\boldsymbol{x}_1' - \boldsymbol{x}_2)\delta(\boldsymbol{x}_2' - \boldsymbol{x}_1)].\end{aligned}$$

ここで，プラス符号はボース粒子，マイナス符号はフェルミ粒子に対応している．

N 粒子系が状態 $|\Phi\rangle$ にあるとき，この系に対する **1 粒子密度行列** $\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ は，次式で定義される．

$$\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \langle \Phi|\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})|\Phi\rangle. \tag{6.35}$$

これは，状態 $|\Phi\rangle$ にある系の位置 $\boldsymbol{y}$ で粒子を 1 個消滅させ，位置 $\boldsymbol{x}$ で粒子を 1 個生成させても系がもとと同じ状態 $|\Phi\rangle$ に留まる確率振幅を表している．特に，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ の場合の 1 粒子密度行列

$$\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}) = \langle\Phi|\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})|\Phi\rangle \tag{6.36}$$

は，位置 $\boldsymbol{x}$ における粒子密度を与える．

系が直交するいろいろな状態 $|\Phi_n\rangle$ $(n=1,2,\cdots)$ に確率 p_n で分布している場合は，1 粒子密度行列は次のように与えられる．

$$\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \sum_n p_n\langle\Phi_n|\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})|\Phi_n\rangle. \tag{6.37}$$

N 粒子系の任意の正規直交基底 $\{|m\rangle\}$ をとり，(6.37) の右辺に完全性条件 $\sum_m |m\rangle\langle m| = \hat{I}$ を挿入すると，

$$\begin{aligned}
\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) &= \sum_{n,m} p_n\langle\Phi_n|\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})|m\rangle\langle m|\Phi_n\rangle \\
&= \sum_{n,m} p_n\langle m|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})|m\rangle \\
&= \mathrm{Tr}\Big\{\sum_n p_n|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n|\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})\Big\} \\
&= \mathrm{Tr}\big\{\hat{\rho}\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})\big\}.
\end{aligned} \tag{6.38}$$

ここで，トレースの定義式 (2.126) を使った．また，

$$\hat{\rho} \equiv \sum_n p_n|\Phi_n\rangle\langle\Phi_n| \tag{6.39}$$

は系の**密度演算子**である．$\mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{A}\}$ を単に $\langle\hat{A}\rangle$ と書くと，

$$\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \mathrm{Tr}\{\hat{\rho}\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})\} = \langle\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})\rangle \tag{6.40}$$

が得られる．

問題 6.1 任意の演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ に対して，

$$\mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\} = \mathrm{Tr}\{\hat{B}\hat{A}\} \tag{6.41}$$

が成立することを示せ．

【解答】 定義式 (2.126) に完全性条件 $\sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{I}$ を挿入すると，

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\{\hat{A}\hat{B}\} &\equiv \sum_m\langle m|\hat{A}\hat{B}|m\rangle = \sum_{m,n}\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n|\hat{B}|m\rangle \\
&= \sum_{m,n}\langle n|\hat{B}|m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle = \sum_n\langle n|\hat{B}\hat{A}|n\rangle \\
&= \mathrm{Tr}\{\hat{B}\hat{A}\}
\end{aligned}$$

が成立する． ∎

6.5 非対角長距離秩序

(6.22) を (6.40) へ代入すると，

$$\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}\langle \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}\rangle e^{-i(\boldsymbol{k}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{q}\boldsymbol{y})}. \tag{6.42}$$

系が空間的に一様で熱平衡状態にある場合は，

$$\langle \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}\rangle = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}\langle \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{k}}\rangle \equiv \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{q}}\langle \hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle \tag{6.43}$$

が成立する．これを示すためにまず，運動量演算子

$$\hat{\boldsymbol{P}} = \hbar\sum_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{p}\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{p}} \tag{6.44}$$

と $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}$ との交換関係を計算すると，

$$[\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}] = \hbar\sum_{\boldsymbol{p}}\boldsymbol{p}[\hat{a}_{\boldsymbol{p}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{p}}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}] = \hbar(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}. \tag{6.45}$$

熱平衡状態にある系の密度演算子は，ハミルトニアン $\hat{H}$ と温度の逆数 $\beta \equiv 1/(k_{\mathrm{B}}T)$ (k_{B} はボルツマン定数) を用いて，

$$\hat{\rho} = Z^{-1}e^{-\beta\hat{H}}, \qquad Z \equiv \mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\} \tag{6.46}$$

と書ける．これと (6.41) および空間的に一様な系では，ハミルトニアンと運動量演算子が交換することを用いると，

$$\begin{aligned}
\langle[\hat{\boldsymbol{P}}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}]\rangle &= Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}(\hat{\boldsymbol{P}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}} - \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}\hat{\boldsymbol{P}})\} \\
&= Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\hat{\boldsymbol{P}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}} - \hat{\boldsymbol{P}}e^{-\beta\hat{H}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}\} \\
&= Z^{-1}\mathrm{Tr}\{e^{-\beta\hat{H}}\hat{\boldsymbol{P}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}} - e^{-\beta\hat{H}}\hat{\boldsymbol{P}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}\} \\
&= 0.
\end{aligned}$$

よって，(6.45) から $(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\langle \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger \hat{a}_{\boldsymbol{q}}\rangle = 0$ となり，(6.43) が成立することがわかる．

(6.43) を (6.42) に代入すると，

$$\begin{aligned}
\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) &= \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}}\langle \hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})} \\
&= \frac{\langle \hat{n}_0\rangle}{V} + \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\langle \hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}.
\end{aligned} \tag{6.47}$$

ここで，最後の等式において，$\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$ の成分を分離し，その他の成分は和を積分に置き換えた．右辺の積分は，$|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty$ の極限をとると，因子 $e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}$ が激しく振動するために 0 となる (リーマン–ルベーグの定理)．よって，次の結果が得られる．

$$\lim_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty}\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\frac{\langle\hat{n}_0\rangle}{V}. \tag{6.48}$$

粒子数密度 N/V を一定にしつつ，N と V を無限大にするという熱力学的極限においても左辺が 0 とならない，すなわち，系が非対角的 ($\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{y}$) な長距離 ($|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty$) 秩序をもつためには，$\langle\hat{n}_0\rangle$ が体積に比例して増大しなければならない．フェルミ粒子系の場合は，パウリの排他原理より常に $\langle\hat{n}_0\rangle\leq 1$ なので，1 粒子密度行列のレベルでは非対角長距離秩序は存在できない．他方，ボース粒子系の場合に $\boldsymbol{k}=0$ の状態にボース–アインシュタイン凝縮すると，$\langle\hat{n}_0\rangle$ は全粒子数，したがって，体積に比例して増大するので ((6.21) 参照), (6.48) は 0 にならない．このように，ボース–アインシュタイン凝縮の本質は，**非対角長距離秩序** (<u>o</u>ff-<u>d</u>iagonal <u>l</u>ong-<u>r</u>ange <u>o</u>rder，略して ODLRO) にある．

ボース凝縮している粒子数密度 $\langle\hat{n}_0\rangle/V$ は，(6.35) で述べたように，ある場所 $\boldsymbol{y}$ で粒子を取り出し，それを遠方の場所 $\boldsymbol{x}$ に移動しても，系がもとと同じ量子状態に戻る確率振幅を与える．粒子が系の量子状態を乱すことなく ($\boldsymbol{y}$ から $\boldsymbol{x}$ へと) 長距離を移動できる可能性は，ODLRO と超流動性との密接な関係を示唆している．

比較のため，T_0 よりも十分高温側での 1 粒子密度演算子の振舞いを調べてみよう．このとき，BEC は存在しないので，(6.47) の右辺の第 1 項は 0，第 2 項で $\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle$ は古典統計分布 (マクスウェル–ボルツマン分布)

$$\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle=e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})} \tag{6.49}$$

に従う．ここで，化学ポテンシャル μ は，$\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle$ の k 積分が全粒子数密度 n に等しいという条件から決められる．すなわち，

$$\begin{aligned} n=\int d^3k\langle\hat{n}_{\boldsymbol{k}}\rangle=e^{\beta\mu}\left(\int dk\, e^{-\beta\frac{\hbar^2k^2}{2m}}\right)^3=e^{\beta\mu}\left(\frac{2\pi m}{\beta\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \\ \longrightarrow \mu=\frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T\ln\left(\frac{\hbar^2n^{\frac{2}{3}}}{2\pi mk_{\mathrm{B}}T}\right). \end{aligned} \tag{6.50}$$

これから，高温では化学ポテンシャルは負になることがわかる．(6.49) を (6.47)

に代入して計算すると，

$$\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \frac{n}{8\pi^3} e^{-\frac{mk_{\mathrm{B}}T}{2\hbar^2}|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|^2} \tag{6.51}$$

が得られる．これから，高温極限 $T \to \infty$ では，$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ なる対角項のみが残ることがわかる．

(6.51) から，非対角秩序が減衰する特徴的な長さが，

$$\lambda = \sqrt{\pi \frac{2\hbar^2}{mk_{\mathrm{B}}T}} = \frac{h}{\sqrt{2\pi mk_{\mathrm{B}}T}} \tag{6.52}$$

で与えられることがわかる (数因子 π は慣習上導入されたもので本質的ではない)．λ は**熱的ド・ブロイ長**とよばれ，同種粒子が区別できない特徴的な距離を表している．これは，4.5 節で述べたコヒーレンス長に相当する長さで，原子の位相は熱的ド・ブロイ長程度の距離にわたり一定に保たれる．特に，BEC が存在すると，(6.48) より系全体にわたり位相がそろう．λ は系の化学ポテンシャル (6.50) が 0 となるときの平均粒子間隔 $n^{-\frac{1}{3}}$ と同程度の長さのスケールでもある．λ はしばしば**熱的ド・ブロイ波長**とよばれるが，振動する波の波長ではなく，粒子の波束 (波の包絡線) の幅を表している．

理想ボース気体の場合，全粒子数を N，ある 1 粒子準位にある粒子数を N_0 とすると，熱平衡状態で BEC が存在するための条件は，「N_0 が N と同程度の大きさとなる」ことである．ここで，「同程度の大きさ」とは，粒子数密度を一定としつつ粒子数と体積を無限大とする熱力学的極限をとった場合に，比 N_0/N が 0 にならないことを意味する．しかし，超流動ヘリウムのように粒子間相互作用が存在する場合は，1 粒子エネルギー準位という概念は明確な意味をもたない．そこで，ペンローズとオンサーガーは，BEC の概念を次のように拡張した[2)]．

N 粒子系の密度演算子を ρ を用いて，1 粒子の還元密度演算子を次のように定義しよう．

$$\hat{\rho}_1 = N\,\mathrm{Tr}_{2,3,\cdots,N}\,\hat{\rho}. \tag{6.53}$$

ここで，$2,3,\cdots,N$ は，1 番目の粒子以外についてトレースをとることを示している (同種粒子であるから，任意の $N-1$ 個の粒子についてトレースをとっても同じ結果が得られる)．密度演算子の座標表示

2) O. Penrose and L. Onsager, Phys. Rev. **104**, 576 (1956).

$$\rho(\boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N; \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_N) = \langle \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_N | \hat{\rho} | \boldsymbol{x}_1, \cdots, \boldsymbol{x}_N \rangle \tag{6.54}$$

を用いると，(6.53) は次のように書ける．

$$\begin{aligned}\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) &= \langle \boldsymbol{y} | \hat{\rho}_1 | \boldsymbol{x} \rangle \\ &= \int d\boldsymbol{x}_2 \cdots \int d\boldsymbol{x}_N \, \rho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N; \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N).\end{aligned} \tag{6.55}$$

これが (6.36) と等価であることは，容易に示すことができる．

ρ_1 を対角化して得られる固有値の最大値を $n_{\max}^{(1)}$ とすると，BEC が存在するための条件は，「$n_{\max}^{(1)}$ が N と同程度の大きさとなる」，すなわち，比 $n_{\max}^{(1)}/N$ が熱力学的極限で 0 にならないことである．以下では，そのような固有値が 1 つしか存在しないものと仮定して話を進めよう．空間的に一様な系では運動量がよい量子数であるから，この場合の BEC の条件は，巨視的な数の粒子が同じ運動量状態を占めることである．

N と同程度の最大固有値に対応する固有状態を $|\Psi\rangle$ とすると，$\hat{\rho}_1$ は次のようにスペクトル分解できる．

$$\hat{\rho}_1 = n_{\max}^{(1)} |\Psi\rangle\langle\Psi| + \sum_{\nu} n_{\nu}^{(1)} |\nu\rangle\langle\nu|. \tag{6.56}$$

ここで，$n_{\max}^{(1)}$ 以外の固有値 $n_{\nu}^{(1)}$ は仮定により，1 と同程度かそれ以下の大きさである．座標表示をとると，

$$\langle \boldsymbol{y} | \hat{\rho}_1 | \boldsymbol{x} \rangle = n_{\max}^{(1)} \langle \boldsymbol{y} | \Psi \rangle \langle \Psi | \boldsymbol{x} \rangle + \sum_{\nu} n_{\nu}^{(1)} \langle \boldsymbol{y} | \nu \rangle \langle \nu | \boldsymbol{x} \rangle. \tag{6.57}$$

波動関数は，$1/\sqrt{V}$ (V は系の体積) のオーダーなので，粒子数密度 N/V を一定にしながら $N \to \infty$，$V \to \infty$ とする**熱力学的極限**あるいは $|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}| \to \infty$ なる極限をとると，右辺の第 1 項以外の項は 0 となる．したがって，$\Psi(\boldsymbol{x})$ を

$$\Psi(\boldsymbol{x}) \equiv \sqrt{n_{\max}^{(1)}} \langle \boldsymbol{x} | \Psi \rangle \tag{6.58}$$

と定義すると，BEC が存在する条件は $|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}| \to \infty$ で，

$$\langle \boldsymbol{y} | \hat{\rho}_1 | \boldsymbol{x} \rangle \to \Psi(\boldsymbol{y}) \Psi^*(\boldsymbol{x}) \tag{6.59}$$

となること，すなわち，非対角長距離秩序 (ODLRO) をもつことであるといえる．(6.59) が成立すると，$\Psi(\boldsymbol{x})$ は非常によい近似で行列 $\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y})$ の固有関数になることがわかる．すなわち，

$$\int d\boldsymbol{y}\,\Psi(\boldsymbol{y})\rho_1(\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}) \simeq n_{\max}^{(1)}\Psi(\boldsymbol{x}), \qquad n_{\max}^{(1)} = \int d\boldsymbol{x}\,|\Psi(\boldsymbol{x})|^2. \tag{6.60}$$

$\Psi(\boldsymbol{x})$ は，**秩序パラメーター**または**凝縮体の波動関数**とよばれ，その空間積分 $\int |\Psi(\boldsymbol{x})|^2\,d\boldsymbol{x} = n_{\max}^{(1)}$ は，凝縮体に含まれる粒子数であると解釈できる．系が非対角長距離秩序をもつ (すなわち，ボース凝縮する) と，N と同程度の巨視的な数の原子が，Ψ で記述される同じ量子状態を占めて全く同じように振る舞う結果，ミクロな量子効果がマクロなスケールへと増幅される．

固体における結晶の周期構造も**長距離秩序**の一例であるが，これは，粒子数密度に関する対角的 $(\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y})$ な長距離秩序である．これに対して，ODLRO は，密度だけでなく位相にも依存しており，後述するように，この位相の空間変化が超流動や超伝導を引き起こす．また，巨視的な波動関数 Ψ は，新しい**熱力学的変数**としての役割も果たす (BEC になると Ψ が熱力学的極限でも消えないことを思い出そう)．ODLRO は，ルビジウム原子のボース–アインシュタイン凝縮を用いて直接観測された[3]．

BEC が存在する条件 (6.59) は，しばしば

$$\rho_1(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \langle\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})\rangle \longrightarrow \langle\hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\rangle\langle\hat{\Psi}(\boldsymbol{y})\rangle \tag{6.61}$$

の形に書かれる．ここで，右辺に現れる $\langle\cdots\rangle$ の意味は，同じ状態に対する期待値とみなすべきではなく，粒子数が 1 だけ違う状態間の行列要素とみなすべきである．粒子数が n の状態に消滅演算子が作用すると，因子 $\sqrt{n}$ が現れることを思い出すと ((1.170) 参照)，BEC の数だけが 1 だけ変化し，他の状態は変化しない行列要素が主要な項であることがわかる．したがって，BEC の原子数を n_0，その他の状態を特徴づけるラベルを全部まとめて ξ と書くと，

$$\langle\hat{\Psi}(\boldsymbol{x})\rangle = \langle n_0-1,\xi|\hat{\Psi}|n_0,\xi\rangle \tag{6.62}$$

となる．

3) I. Bloch, T. Hänsch, and T. Esslinger, Nature **403**, 166 (2000).

6.6 フェルミ粒子系における非対角長距離秩序

理想フェルミ粒子系の大分配関数は，各状態の占有数が 0 または 1 なので，

$$\Xi = \prod_{\boldsymbol{k}} \sum_{n_{\boldsymbol{k}}=0}^{1} (e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})})^{n_{\boldsymbol{k}}} = \prod_{\boldsymbol{k}} (1 + e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})}) \tag{6.63}$$

で与えられる．したがって，熱力学的ポテンシャルは，

$$\Omega \equiv -\beta^{-1} \ln \Xi = -\beta^{-1} \ln(1 + e^{\beta(\mu-\epsilon_{\boldsymbol{k}})}) \tag{6.64}$$

で与えられる．これから，波数 $\boldsymbol{k}$ の量子状態を占める粒子の期待値は，

$$\bar{n}_{\boldsymbol{k}} = -\frac{\partial \Omega_{\boldsymbol{k}}}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu)} + 1} \tag{6.65}$$

となる．特に，絶対零度では (6.65) は，

$$n_{\boldsymbol{k}} = \theta(k_{\mathrm{F}} - |\boldsymbol{k}|) \tag{6.66}$$

となる．ここで，$\theta(x)$ は，$x > 0$ で 1，$x < 0$ で 0，$x = 0$ で 1/2 の値をとる**階段関数**である．また，k_{F} は $k_{\mathrm{F}} = \sqrt{2m\mu}/\hbar$ で与えられ，**フェルミ波数**とよばれる．こうして，絶対零度ではフェルミ粒子系は，波数の大きさが 0 からフェルミ波数 k_{F} のところまで各状態に粒子が 1 個ずつ詰まっており，それより波数の大きい状態は空である．

フェルミ粒子系の場合は，パウリの排他原理により ρ_1 の最大固有値は 1 以上にはなれず，系が 1 粒子状態にボース凝縮することはできない．それゆえ，理想フェルミ気体は ODLRO を示さず BEC は起きない．

問題 6.2 絶対零度に対する理想フェルミ気体に対して，1 粒子密度行列を計算して，それが，

$$\langle \boldsymbol{y}|\rho_1|\boldsymbol{x}\rangle = \frac{1}{2\pi^2 r_{12}^3}(\sin k_{\mathrm{F}} r_{12} - k_{\mathrm{F}} r_{12} \cos k_{\mathrm{F}} r_{12}) \tag{6.67}$$

となることを示せ．この結果から，$r_{12} \equiv |\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}| \to \infty$ で $\langle \boldsymbol{x}|\rho_1|\boldsymbol{y}\rangle \to 0$ となることがわかる．

【解答】 (6.66) を

$$\langle \boldsymbol{y}|\rho_1|\boldsymbol{x}\rangle = \frac{1}{V}\sum_{\boldsymbol{k}} n_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3k\, n_{\boldsymbol{k}} e^{-i\boldsymbol{k}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})}$$

に代入すると，

$$\langle \boldsymbol{y}|\rho_1|\boldsymbol{x}\rangle = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{k_{\mathrm{F}}} dk\, k^2 \int_0^{\pi} d\theta\, \sin\theta e^{-ik|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\cos\theta}.$$

これを積分すると (6.67) が得られる． ∎

フェルミ粒子系がODLROを示すためには，少なくとも2個のフェルミ粒子が対をつくりそれがボース凝縮を起こす必要がある．これをみるために，2粒子の還元密度演算子

$$\rho_2 = N\,\mathrm{Tr}_{3,4,\cdots,N} \tag{6.68}$$

を考え，それを対角化して得られる固有値の最大値 $n_{\max}^{(2)}$ を考えよう．フェルミ粒子の対はボース凝縮することができるので，一般に，$n_{\max}^{(2)} \leq N$ であることが示される[4]．いま，2粒子の還元密度演算子が N と同じ程度の大きさの固有値 $n_{\max}^{(2)}$ をもつとし，それに対応する固有状態を $|\phi\rangle$ と書こう．このとき，ρ_2 は次のようにスペクトル分解される．

$$\rho_2 = n_{\max}^{(2)}|\phi\rangle\langle\phi| + \sum_{\mu} n_{\mu}^{(2)}|\mu\rangle\langle\mu|. \tag{6.69}$$

両辺の座標表示をとり，$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \sqrt{n_{\max}^{(2)}}\langle\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2|\phi\rangle$ などとおくと，

$$\begin{aligned}&\langle\boldsymbol{r}_1',\boldsymbol{r}_2'|\rho_2|\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\rangle \\ &\quad = \Phi(\boldsymbol{r}_1',\boldsymbol{r}_2')\Phi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) + \sum_{\mu} n_{\mu}^{(2)}\langle\boldsymbol{r}_1',\boldsymbol{r}_2'|\mu\rangle\langle\mu|\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2\rangle.\end{aligned} \tag{6.70}$$

ボース粒子の場合と同様の議論により，$|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_1'| \to \infty$ とすると，右辺の第2項は消えるが，第1項は $\boldsymbol{r}_1 \simeq \boldsymbol{r}_2$ でかつ $\boldsymbol{r}_1' \simeq \boldsymbol{r}_2'$ であれば残る．$\langle\boldsymbol{r}_1',\boldsymbol{r}_2'|\phi\rangle$ は，$1/\sqrt{V}$ (V は系の体積) に比例するので，$n_{\max}^{(2)}$ が N と同程度であれば，熱力学的極限をとっても右辺の第1項は残ることがわかる．このとき，フェルミ粒子系は2粒子のODLROをもつという．一般に，フェルミ粒子系が2粒子の相関をもち，それがODLROを示すとき，対応する2粒子を**クーパー対**という．$\Phi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ は秩序パラメーターまたはクーパー対の波動関数とみなすことができる．

超伝導や ^{3}He 超流動では，2個の電子やヘリウム原子がクーパー対をつくり，それらがボース凝縮した状態であると考えられる．この場合，上記の $n_{\max}^{(2)}$ は N のオーダーの固有値をもち，上記の議論がそのまま当てはまる．上記の議論はさらに一般化することが可能である．例えば，^{4}He の超流動は，^{4}He 原子集団のBECとみなす代わりに，^{4}He 原子核と電子の集団とみなして，原子核(He)と電子2個 (e_1, e_2) の3粒子還元密度演算子 $\langle \mathrm{He}', e_1', e_2'|\rho_3|\mathrm{He}, e_1, e_2\rangle$ が，ODLROをもつ状態であると考えることもできる．

---

4) C. N. Yang, Rev. Mod. Phys. **34**, 694 (1962).

6.7　ボース粒子系の多体波動関数の性質

ボース粒子系の基底状態の波動関数は実数にとることができる (実数でなければ流れが生じてしまうため[5]). 波動関数が満たすべき方程式は, 規格化条件を満足しながら**エネルギー汎関数** (汎関数については付録の A.3 節を参照)

$$F[\Psi] = \int d\boldsymbol{x}_1 \cdots \int d\boldsymbol{x}_N \left[\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} (\nabla_i \Psi)^2 + V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N)\Psi^2 \right] \quad (6.71)$$

を最小にするという**変分原理**から求められる. ここで, $V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N)$ は, 粒子間の相互作用ポテンシャルであり, 発散はしないものと仮定する. Ψ の規格化条件を満足するためにラグランジュの未定乗数 E を導入して, 変分原理

$$\frac{\delta}{\delta\Psi}\left(F - E \int d\boldsymbol{x}_1 \cdots \int d\boldsymbol{x}_N \, |\Psi|^2 \right) = 0 \quad (6.72)$$

より (導出は付録 A.3 節を参照) シュレーディンガー方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^{N} \nabla_i^2 + V(\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_N) \right) \Psi = E\Psi \quad (6.73)$$

が得られる.

同種ボース粒子系の多体波動関数は, 粒子の入れ替えに対して対称である.

$$\Psi(\cdots, \boldsymbol{x}_i, \cdots, \boldsymbol{x}_j, \cdots) = \Psi(\cdots, \boldsymbol{x}_j, \cdots, \boldsymbol{x}_i, \cdots). \quad (6.74)$$

いま, 任意の 2 粒子の座標 $\boldsymbol{x}_i$ と $\boldsymbol{x}_j$ をとり, $\boldsymbol{x}_j$ を固定して波動関数を座標の差 $\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j$ の関数とみなすと, 波動関数の対称性から Ψ は $\boldsymbol{x}_i - \boldsymbol{x}_j$ の偶関数でなければならない. この関数が, $\boldsymbol{x}_i$ のある値のところで符号を変えたとしよう. このとき, $|\Psi|$ も上記の変分原理を満足するので解である ((6.71) と (6.72) が $\Psi \to -\Psi$ に対して不変だから). ところが, その場所で $|\Psi|$ の 1 階微分は不連続となる. しかし, 問題 1.1 で示したように, ポテンシャルエネルギーが有限な領域では, $|\Psi|$ の 1 階微分はいたるところ連続でなければならないので, 矛盾する. したがって, Ψ は非負にとることができる.

---

5) 波動関数は, $\Psi = ae^{i\chi}$ のように振幅 a と位相 χ に分解することができる (a, χ はともに実数). χ が定数の場合は, 任意の定数の位相は物理量に影響を与えないので, 無視することができる. χ が座標に依存して変化する場合は, 流れ

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \frac{\hbar}{2mi} \int d\boldsymbol{x}_1 \cdots d\boldsymbol{x}_N \sum_{k=1}^{N} (\psi^* \nabla_k \Psi - \Psi \nabla_k \Psi^*)\, \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_k)$$

が生じて, その分だけ系の運動エネルギーが高くなってしまう.

いま，このような条件を満たす 2 つの非負な解 Ψ_1 と Ψ_2 が存在すると仮定すると，シュレーディンガー方程式の線形性より，$\Psi_1 - \Psi_2$ も最低エネルギー固有値に属する解であり，しかも符号を変えない．これは常に $\Psi_1 > \Psi_2$ あるいは $\Psi_1 < \Psi_2$ であることを意味する．しかし，これは Ψ_1 と Ψ_2 が規格化されているという仮定に矛盾する．以上の結果より，ボース粒子系の基底状態の波動関数は非負にとれかつ縮退がないことがわかる．

6.8 非平衡な BEC と超流動

系の状態が時間的に変化する非平衡な場合に拡張して考える[6]．各時刻において，(6.53) で定義される 1 粒子密度演算子を対角的にする表示をとると，

$$\hat{\rho}_1(t) = \sum_\nu n_\nu(t)|\nu(t)\rangle\langle\nu(t)|. \tag{6.75}$$

両辺の座標表示をとると，

$$\begin{aligned}\rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}; t) &= \langle \boldsymbol{y}|\hat{\rho}_1(t)|\boldsymbol{x}\rangle = \sum_\nu n_\nu(t)\langle \boldsymbol{y}|\nu(t)\rangle\langle\nu(t)|\boldsymbol{x}\rangle \\ &= \sum_\nu n_\nu(t)\psi_\nu^*(\boldsymbol{x}, t)\psi_\nu(\boldsymbol{y}, t).\end{aligned} \tag{6.76}$$

ν でラベルづけされる状態のうちで，ボース凝縮している状態が 1 つだけ存在すると仮定し，それを $\nu = 0$ としよう．このとき，$n_0 \sim O(N)$ で他の状態に対しては $n_{\nu\neq 0} \sim O(1)$ である．$\nu = 0$ 以外の状態は，すべて $O(1)$ のオーダーの微小量でしかも互いに直交しているので，$|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}| \to \infty$ では (6.47) の場合と同様に打ち消しあい，$\nu = 0$ の項の寄与に比べて無視することができる．したがって，

$$\begin{aligned}\lim_{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}|\to\infty} \rho_1(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}; t) &= n_0(t)\psi_0^*(\boldsymbol{x}, t)\psi_0(\boldsymbol{y}, t) \\ &\equiv \Psi_0^*(\boldsymbol{x}, t)\Psi_0(\boldsymbol{y}, t).\end{aligned} \tag{6.77}$$

ここで，$\Psi_0(\boldsymbol{x}, t) \equiv \sqrt{n_0(t)}\psi_0(\boldsymbol{x}, t)$ は，非平衡な系における凝縮体の波動関数 (秩序パラメーター) である．凝縮体の粒子密度は，

6) 本節から 6.10 節までは，次の文献を参考にした．
A.J.Leggett, in "Low Temperature Physics: Proceedings", Lecture notes in Physics, **394**, M.J.R.Hoch and R.H.Lemmer (eds.) (Springer-Verlag, Berlin, 1991).

$$\rho(\boldsymbol{x},t) = |\Psi_0(\boldsymbol{x},t)|^2 \tag{6.78}$$

で与えられる．連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(\boldsymbol{x},t) + \mathrm{div}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t) = 0 \tag{6.79}$$

を満足する粒子の流れの密度は次式で与えられる．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t) &= \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi_0^*(\boldsymbol{x},t)\nabla\Psi_0(\boldsymbol{x},t) - \Psi_0(\boldsymbol{x},t)\nabla\Psi_0^*(\boldsymbol{x},t)\right)\\ &= \mathrm{Re}\left(\Psi_0^*(x,t)\hat{\boldsymbol{v}}\Psi_0(\boldsymbol{x},t)\right).\end{aligned} \tag{6.80}$$

ここで，$\hat{\boldsymbol{v}} = (\hbar/mi)\nabla$ は速度演算子である．秩序パラメーター $\Psi_0(\boldsymbol{x},t)$ を

$$\Psi_0(\boldsymbol{x},t) = A(\boldsymbol{x},t)e^{i\phi(\boldsymbol{x},t)} \tag{6.81}$$

のように振幅と位相に分け，これを (6.78), (6.80) に代入すると，

$$\rho(\boldsymbol{x},t) = A^2(\boldsymbol{x},t), \tag{6.82}$$

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t) = A^2(\boldsymbol{x},t)\frac{\hbar}{m}\nabla\phi(\boldsymbol{x},t) \tag{6.83}$$

が得られる．**超流動速度** $\boldsymbol{v}_\mathrm{s}$ は，$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t)$ と $\rho(\boldsymbol{x},t)$ の比として定義される．

$$\boldsymbol{v}_\mathrm{s}(\boldsymbol{x},t) \equiv \frac{\boldsymbol{j}(\boldsymbol{x},t)}{\rho(\boldsymbol{x},t)} = \frac{\hbar}{m}\nabla\phi(\boldsymbol{x},t). \tag{6.84}$$

凝縮体の位相は，超流動速度に対するポテンシャルの役割を果たしていることがわかる．これから，超流動体が存在している領域では**渦なし条件**

$$\mathrm{rot}\ \boldsymbol{v}_\mathrm{s} = 0 \tag{6.85}$$

が成立していることがわかる．超流動速度を超流動体内の閉曲線 C に沿って線積分した量

$$\Gamma \equiv \oint_C \boldsymbol{v}_\mathrm{s}\, d\boldsymbol{l} = \int \mathrm{rot}\ \boldsymbol{v}_\mathrm{s}\, d\boldsymbol{S} \tag{6.86}$$

は**循環**とよばれ，C に沿った超流動体の流れを特徴づける量である．ここで，$d\boldsymbol{l}$ は曲線 C に沿った無限小の線ベクトル，$d\boldsymbol{S}$ は C の内側の面要素ベクトルで面に垂直方向を向いている．もし，C 内のいたるところで渦なし条件 (6.85) が成立すれば $\Gamma = 0$ となる．しかし，C 内で Ψ_0 が 0 となる点が存在すれば，その点では位相 ϕ は定義できないので，条件 (6.85) は成立せず，Γ は必ずし

も 0 とならない．他方，量子力学では Γ は任意の値をとることができない．これをみるために，(6.86) の $\boldsymbol{v}_{\rm s}$ に (6.84) を代入すると，

$$\Gamma \equiv \frac{\hbar}{m} \oint_C \nabla\phi(\boldsymbol{x}, t)\, d\boldsymbol{l}. \tag{6.87}$$

右辺の積分は，閉曲線 C に沿って 1 周したときの位相 ϕ の変化を与えるが，凝縮体の波動関数の一価性より，それは 2π の整数倍の値しかとれない．したがって，

$$\Gamma = \kappa_0 n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots), \qquad \kappa_0 \equiv \frac{h}{m}. \tag{6.88}$$

このように循環は h/m の整数倍しかとれない．これを**循環の量子化**という[7]．

超流動体の入ったビーカーを回転させると，液体の表面には通常の流体と同様に放物線型のくぼみが生じる．これは，循環の値が 0 でないことを示している．このことと，超流動体が渦なし条件 (6.85) を満足しなければならないことは矛盾しないのだろうか．オンサーガーは，$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{v}_{\rm s}$ が液体の微小な領域でのみ 0 でない値をとることを仮定することにより，この問題が解決できることを指摘した．すなわち，超流動体を**渦糸**とよばれる細い糸のような渦が貫いており．その領域では，超流動体密度は 0 となるので，$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{v}_{\rm s}$ は 0 と異なる値をとれる．ビーカーの半径を R，角速度を Ω とすると，

$$\oint \boldsymbol{v}_{\rm s}\, d\boldsymbol{l} = \Omega R \cdot 2\pi R = 2\pi R^2 \cdot \Omega. \tag{6.89}$$

これが (6.88) に等しいとおくと，渦糸が密度 $n/\pi R^2 = 2\Omega/\kappa_0$ で分布していると仮定することにより，観測されている液体表面のくぼみが理解できる．

---

7) 循環の量子化は，BEC が 1 つの巨視的波動関数 Ψ で記述されるということを仮定して導かれている．このことは，^{4}He のような斥力相互作用をする内部自由度をもたない BEC の場合は正しいが，引力相互作用をする場合や内部自由度をもつ BEC の場合は複数の BEC が共存することがあり，この場合は，循環は必ずしも量子化されない．M. Ueda and A.J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **83**, 1489 (1999).

6.9 オイラー方程式

ボース粒子系の場の演算子は，交換関係

$$[\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')] = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{6.90}$$

を満足する．$\hat{\Psi}(\boldsymbol{r})$ を (6.81) の形に形式的に分解しよう．

$$\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r})}e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}. \tag{6.91}$$

(6.90) と (6.91) が両立するためには，演算子 $\hat{\rho}$ と $\hat{\varphi}$ の間に次の交換関係が成立すれば十分である．

$$[\hat{\rho}(\boldsymbol{r}), \hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')] = i\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'). \tag{6.92}$$

実際，(6.92) より

$$\hat{\rho}(\boldsymbol{r}) = i\frac{\delta}{\delta\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}, \qquad \hat{\varphi}(\boldsymbol{r}) = -i\frac{\delta}{\delta\hat{\rho}(\boldsymbol{r})} \tag{6.93}$$

が成立する (汎関数微分については付録 A.3 節を参照) ので，

$$[\hat{\rho}(\boldsymbol{r}), e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')}] = -e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{6.94}$$

が成立する．さらに，

$$\begin{aligned}[e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}, f[\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')]] &\simeq [e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}, \hat{\rho}(\boldsymbol{r}')]f'[\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')] \\ &= e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')f'[\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')] \end{aligned} \tag{6.95}$$

と近似すると[8]，

---

8) この近似の意味を明らかにするために，次の交換関係を考えよう．

$$\begin{aligned}[\hat{A}, \hat{B}^n] &= [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{n-1} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^{n-2} + \cdots + \hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}] \\ &\simeq [\hat{A}, \hat{B}](\hat{B}^n)'. \end{aligned} \tag{$*$}$$

右辺の最後の近似が成立するならば，

$$[\hat{A}, f(\hat{B})] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}[\hat{A}, f^{(n)}(0)\hat{B}^n] = [\hat{A}, \hat{B}]\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(\hat{B}^n)' = [\hat{A}, \hat{B}]f'(\hat{B})$$

となり，(6.95) が正当化される．($*$) で行った近似は，

$$\hat{B}^{n-k}[\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^k = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{B}^n + [\hat{B}^{n-k}, [\hat{A}, \hat{B}]]\hat{B}^k$$

で最後の二重交換関係を無視することと等価である．(6.92) からわかるように，交換関係は密度 $\hat{\rho}$ に対して密度が 1 ($\times i$) の項を生じる．したがって，高次の交換関係が無視できるためには，粒子数密度が 1 に比べて十分大きいことが必要である．この条件は，系が BEC を起こしていれば満足される．

$$\left[e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}, \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')}\right] \simeq e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})} \frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')}} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'), \tag{6.96}$$

$$\left[\sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r})}, e^{-i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')}\right] \simeq e^{-i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')} \frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r})}} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{6.97}$$

が導かれる．これから，

$$\begin{aligned}
[\hat{\Psi}(\boldsymbol{r}), \hat{\Psi}^\dagger(\boldsymbol{r}')] &= \left[\sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r})} e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}, e^{-i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')} \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')}\right] \\
&= \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r})} e^{-i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')} \left[e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})}, \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')}\right] \\
&\quad + \left[\sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r})}, e^{-i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')}\right] \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')} e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})} \\
&\simeq \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r})} e^{-i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')} e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})} \frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')}} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \\
&\quad + e^{-i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r}')} \frac{1}{2\sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')}} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \sqrt{\hat{\rho}(\boldsymbol{r}')} e^{i\hat{\varphi}(\boldsymbol{r})} \\
&= \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')
\end{aligned} \tag{6.98}$$

が得られ，(6.90) が再現される．

(6.92) の両辺を $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{r}'$ について系の体積 V にわたって積分し，位相演算子 $\hat{\varphi}$ と粒子数演算子 $\hat{N}$ を

$$\hat{\phi} \equiv \frac{1}{V} \int \hat{\varphi}(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r}, \qquad \hat{N} \equiv \int \hat{\rho}(\boldsymbol{r})\, d\boldsymbol{r} \tag{6.99}$$

のように定義すると，次の粒子数と位相の不確定性関係が導かれる．

$$[\hat{N}, \hat{\phi}] = i. \tag{6.100}$$

これから，

$$\hat{\phi} = -i \frac{\partial}{\partial \hat{N}} \tag{6.101}$$

が導かれる．これを使うと，

$$\frac{\partial \hat{\phi}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\phi}] = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{N}}. \tag{6.102}$$

両辺の期待値をとり，$\langle \hat{\phi} \rangle = \phi$, $\langle \hat{H} \rangle = E$ とおくと，

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial N} = -\frac{1}{\hbar} \mu. \tag{6.103}$$

ここで，$\mu \equiv \partial E / \partial N$ は化学ポテンシャルである．両辺に ∇ を作用させて，(6.84) を代入すると，超流動速度の従う**オイラー方程式**

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = \frac{\partial \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} \cdot \nabla)\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = -\frac{1}{m}\nabla\mu \tag{6.104}$$

が得られる．

6.10　2 流体模型

超流動体が壁に対して速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ で動いている準安定状態を考えよう．流れの密度 $\boldsymbol{j}$ は $\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} = \boldsymbol{0}$ のとき $\boldsymbol{0}$ だから，$\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ が小さいときは次のような線形関係にあると考えられる．

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \int K_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}'. \tag{6.105}$$

ここで，K_{s} は**線形応答理論**における**応答関数**とよばれる量である[9]．$\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ の空間変化が緩やかな場合は，(6.105) の積分から $\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ を外へ出すことができて，

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \rho_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}), \qquad \rho_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}) \equiv \int K_{\mathrm{s}}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\, d\boldsymbol{r}' \tag{6.106}$$

という局所的な関係式が導ける．超流動速度は (6.84) で定義される微視的な量であるが，超流動密度は (6.106) の定義からわかるように粗視化された流体力学的概念である．BEC は 1 粒子密度行列の熱力学的極限から定義される ((6.48) とそれにつづくパラグラフ参照) 熱力学的概念であるのに対して，超流動密度は線形応答理論から定義される**輸送係数**[9] の一種である．

常流動体の密度 ρ_{n} は，全粒子数密度 ρ と ρ_{s} との差 $\rho - \rho_{\mathrm{s}}$ で定義される．常流動体は超流動体からのフォノンなどの**準粒子励起**の集合と解釈できる．全系が速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ で動く場合，質量流は $\rho\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ である．準粒子があると，この部分も質量流に寄与するので，これを $\rho_{\mathrm{n}}(\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}})$ と書こう．したがって，全質量流は，

$$\begin{aligned} \boldsymbol{j} &= \rho\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} + \rho_{\mathrm{n}}(\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}) = (\rho - \rho_{\mathrm{n}})\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} + \rho_{\mathrm{n}}\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} \\ &= \rho_{\mathrm{s}}\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} + \rho_{\mathrm{n}}\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}. \end{aligned} \tag{6.107}$$

常流動体の速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}$ は (6.107) で定義されるものと考えられる．超流動成分は渦なしの**ポテンシャル流** ((6.84), (6.85) 参照)，常流動成分は**粘性流**である．

全質量流に対する加速方程式は圧力を P として，

$$\frac{d}{dt}\boldsymbol{j} = -\nabla P \tag{6.108}$$

9)　鈴木増雄，岩波講座 現代の物理学 4「統計力学」(岩波書店).

で与えられる．超流動体を記述する運動方程式は，(6.85), (6.104), (6.108) で与えられる．系を超流動成分と常流動成分の 2 成分に分ける理論を **2 流体模型**という．

(6.108) の左辺に (6.107) を代入すると，

$$\rho_s \dot{\boldsymbol{v}}_s + \rho_n \dot{\boldsymbol{v}}_n = -\nabla P. \tag{6.109}$$

$\dot{\boldsymbol{v}}_s$ に (6.104) を代入すると，

$$\rho_n \dot{\boldsymbol{v}}_n = \frac{\rho_s}{m}\nabla\mu - \nabla P \tag{6.110}$$

が得られる．これは，常流動速度の運動方程式とみなすことができる．

次に，系全体が，温度 T，圧力 P，全粒子数 N の熱平衡状態にある場合を考えよう．温度，圧力，粒子数を熱力学的変数とする熱力学関数は，ギブスの自由エネルギー $G(T,P,N)$ である．G は示量変数としては粒子数を含むだけなので，任意のパラメーター α に対して，

$$G(T,P,\alpha N) = \alpha G(T,P,N) \tag{6.111}$$

が成立する．両辺を α で微分して $\alpha = 1$ とおけば，

$$G = \frac{\partial G}{\partial N}N = \mu N. \tag{6.112}$$

これを熱力学関係式

$$dG = -S\,dT + V\,dP + \mu\,dN \tag{6.113}$$

に代入すれば，次の**ギブス–デュエムの関係式**が得られる．

$$S\,dT - V\,dP + N\,d\mu = 0. \tag{6.114}$$

系に温度勾配がない場合 ($\nabla T = 0$) は，

$$\nabla P = \frac{N}{V}\nabla\mu = \frac{\rho}{m}\nabla\mu \tag{6.115}$$

となる ($\rho = mN/V$)．(6.115) を (6.110) の右辺に代入すると，

$$\rho_n \dot{\boldsymbol{v}}_n = \frac{1}{m}(\rho_s - \rho)\nabla\mu. \tag{6.116}$$

絶対零度で系が定常的な場合は $\dot{\boldsymbol{v}}_n = 0$ なので $\rho_s = \rho$．すなわち，絶対零度では熱平衡状態にある超流動体の密度は全密度に等しい．これに対して，相互作用のある系では BEC の粒子密度は一般に全粒子密度よりも小さくなる．

6.11 ランダウの判定条件

超流動状態の安定性の判定基準の 1 つに**ランダウの判定条件**がある．いま，超流動体中を運動する不純物を考え，これが超流動体中を抵抗なしで動ける条件を考えよう．不純物が抵抗を受けるとその反作用で超流動体は励起されるので，この条件は超流動体が不純物によって励起されないための条件と同じである．超流動体中を運動する不純物を含む多粒子系を実験室系と不純物と同じ速度 $\boldsymbol{v}$ で運動する不純物の静止系の 2 つの座標系で考察する．

実験室系 (I) では，超流動体は静止しているので，超流動体のハミルトニアンと全運動量は，

$$\hat{H}_{\mathrm{I}} = \sum_i \frac{m}{2}\boldsymbol{v}_i^2 + \sum_{i>j} V(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j), \qquad \hat{P}_{\mathrm{I}} = \sum_i m\boldsymbol{v}_i \tag{6.117}$$

で与えられる．不純物の静止系 (II) では，超流動体の各粒子の速度は $\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}$ なので，

$$\hat{H}_{\mathrm{II}} = \sum_i \frac{m}{2}(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v})^2 + \sum_{i>j} V(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j) = \hat{H}_{\mathrm{I}} - \hat{P}_{\mathrm{I}}\boldsymbol{v} + \frac{m}{2}\boldsymbol{v}^2 N, \tag{6.118}$$

$$\hat{P}_{\mathrm{II}} = \sum_i m(\boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v})\hat{P}_{\mathrm{I}} - m\boldsymbol{v}N. \tag{6.119}$$

まず，多粒子系が基底状態 $|\mathrm{GS}\rangle$ にあり，実験室系 (I) において，系が全体として静止している場合を考えよう．このとき，

$$\hat{H}_{\mathrm{I}}|\mathrm{GS}\rangle = E_0|\mathrm{GS}\rangle, \qquad \hat{P}_{\mathrm{I}}|\mathrm{GS}\rangle = 0. \tag{6.120}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{II}}|\mathrm{GS}\rangle = \left(E_0 + \frac{m}{2}\boldsymbol{v}^2 N\right)|\mathrm{GS}\rangle, \qquad \hat{P}_{\mathrm{II}}|\mathrm{GS}\rangle = -m\boldsymbol{v}N|\mathrm{GS}\rangle. \tag{6.121}$$

次に，不純物により系が励起され実験室系において，多粒子系が励起エネルギー $\epsilon_{\boldsymbol{p}}$，運動量 $\boldsymbol{p}$ をもった状態 $|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle$ にあるとしよう．このとき，

$$\hat{H}_{\mathrm{I}}|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle = (E_0 + \epsilon_{\boldsymbol{p}})|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle, \qquad \hat{P}_{\mathrm{I}}|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle = \boldsymbol{p}|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle, \tag{6.122}$$

$$\hat{H}_{\mathrm{II}}|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle = \left(E_0 + \epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{p}\boldsymbol{v} + \frac{m}{2}\boldsymbol{v}^2 N\right)|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle, \tag{6.123}$$

$$\hat{P}_{\mathrm{II}}|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle = (\boldsymbol{p} - m\boldsymbol{v}N)|\epsilon_{\boldsymbol{p}}, \boldsymbol{p}\rangle. \tag{6.124}$$

ギブスの正準集団は，外部ポテンシャルの静止系 (いまの場合はⅡ系) において定義されるので，励起前後における熱平衡状態にある系のエネルギーの変化は，(6.121) と (6.123) の差で与えられる．

$$\Delta E = \epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{p}\boldsymbol{v}. \tag{6.125}$$

ΔE はII系からみた準粒子のエネルギーである．$\Delta E > 0$ ならば準粒子は励起されず，系は熱力学的に安定である．逆に $\Delta E < 0$ の場合は，準粒子が励起される．こうして，不純物の速度が流体の**位相速度** $\epsilon_{\boldsymbol{p}}/p$ を超えると，

$$\theta = \cos^{-1}\left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{p}}}{pv}\right) \tag{6.126}$$

を満足する θ 方向に，運動量が $\boldsymbol{p}$ でエネルギーが $\epsilon_{\boldsymbol{p}}$ の励起が放出される (これは**チェレンコフ放射**とみなすことができる)．こうして，不純物の運動が超流動体を励起するために必要な最小速度 (これは**臨界速度**とよばれる) は，

$$v_{\mathrm{c}} = \min\left(\frac{\epsilon_{\boldsymbol{p}}}{p}\right) \tag{6.127}$$

であることがわかる．逆に $v < v_{\mathrm{c}}$ であれば，不純物は超流動体中を抵抗なしで運動することができる．(6.127) を**ランダウの判定条件**という．

ランダウは $\boldsymbol{v}$ を超流動体と容器との相対速度と考え，$v < v_{\mathrm{c}}$ ならば超流動体は減衰せずに流れ続けると考えた．しかし，現実の容器の壁は原子スケールのミクロな凹凸があり，それと超流動体との相互作用を上記のような単純なモデルで記述することはできない．ランダウの判定条件は，ここで述べたような単純な物体の運動に対する超流動性の条件[10)]と考えるべきであり，容器に対して運動している超流動体に対する安定性の条件と考えることはできない．

6.12 常流動体密度

凝縮体の静止系からみて運動量が $\boldsymbol{p}$ の準粒子の分布関数を $f_{\boldsymbol{p}}$ とすると，準粒子の全運動量密度は，

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{qp}} = \int \frac{d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \boldsymbol{p} f_{\boldsymbol{p}} \tag{6.128}$$

で与えられる．凝縮体が速度 $\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ で動いている実験室系からみると，**ガリレイ変換**によって全運動量密度は (6.128) に比べて $\rho\boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ だけ増加する ($\rho = nm$ は全質量密度)，

10) 原子気体の BEC を用いた比較的理想的な状況下での臨界速度の測定が次の文献で報告されている．C.Raman, M.Köhl, R.Onfrio, D.S.Durfee, C.E.Kuklewicz, Z.Hadzibabic, and W.Ketterle, Phys. Rev. Lett. **83**, 2502 (1999).

$$\boldsymbol{j} = \rho \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}} + \boldsymbol{j}_{\mathrm{qp}}. \tag{6.129}$$

さて，準粒子が熱平衡状態にある系を実験室系からみた速度を $\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}}$ とすると，超流動体からみた系の速度は $\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ となる．したがって，実験室系からみた励起エネルギーを $\epsilon_{\boldsymbol{p}}$ とすると，準粒子が熱平衡状態にある超流動体と一緒に動く系からみた準粒子のエネルギーは，(6.125) から $\epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{p}(\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}})$ で与えられる．それゆえ，熱平衡状態にある準粒子の分布関数は，

$$f_{\mathrm{qp}} = \frac{1}{e^{\beta[\epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{p}(\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}})]} - 1} \tag{6.130}$$

で与えられる．これを (6.128) へ代入すると，

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{qp}} = \int \frac{d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\boldsymbol{p}}{e^{\beta[\epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{p}(\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}})]} - 1}. \tag{6.131}$$

右辺は $\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ に比例するので，$\boldsymbol{j}_{\mathrm{qp}}$ と $(\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}})/|\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}|^2$ との内積をとって，$\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}$ を掛けたものは $\boldsymbol{j}_{\mathrm{qp}}$ に一致する．したがって，

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{qp}} = \rho_{\mathrm{n}}(|\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}|)(\boldsymbol{v}_{\mathrm{n}} - \boldsymbol{v}_{\mathrm{s}}), \tag{6.132}$$

$$\rho_{\mathrm{n}}(v) = \int \frac{d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}}{v^2} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v})} - 1}. \tag{6.133}$$

相対速度 $\boldsymbol{v}$ が小さい場合は，

$$f_{\boldsymbol{p}}^0 \equiv \frac{1}{e^{\beta\epsilon_{\boldsymbol{p}}} - 1} \tag{6.134}$$

とおいて，(6.133) の分布関数を $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}$ のまわりに展開すると，

$$\frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v})} - 1} \simeq f_{\boldsymbol{p}}^0 - \left(\frac{\partial f_{\boldsymbol{p}}^0}{\partial \epsilon_{\boldsymbol{p}}}\right) \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} \tag{6.135}$$

これを (6.133) に代入し，$\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v}$ を $\boldsymbol{p}$ 積分すると消えることに注意すると，

$$\rho_{\mathrm{n}} = \int \frac{d\boldsymbol{p}}{(2\pi\hbar)^3} \frac{(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v})^2}{v^2} \left(-\frac{\partial f_{\boldsymbol{p}}^0}{\partial \epsilon_{\boldsymbol{p}}}\right) \tag{6.136}$$

が得られる．$(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v})^2$ を $\boldsymbol{p}$ の角度方向について積分すると，

$$\rho_n = \frac{1}{6\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dp\, \boldsymbol{p}^4 \left(-\frac{\partial f_{\boldsymbol{p}}^0}{\partial \epsilon_{\boldsymbol{p}}}\right) \tag{6.137}$$

が得られる．ρ_{n} は**常流動体密度**とよばれる．

希薄なボース気体の場合，音速を s として $T \ll T_* \equiv ms^2/k_{\mathrm{B}}$ の場合，$\epsilon_{\boldsymbol{p}} = sp$ である．これを (6.137) へ代入すると，

$$\rho_n = \frac{1}{6\pi^2\hbar^3 s^5}\int_0^\infty d\epsilon_{\boldsymbol{p}}\ \epsilon_{\boldsymbol{p}}^4\left(-\frac{\partial f_{\boldsymbol{p}}^0}{\partial \epsilon_{\boldsymbol{p}}}\right)$$
$$= \frac{2(k_{\rm B}T)^4}{3\pi^2\hbar^3 s^5}\int_0^\infty dx\ \frac{x^3}{e^x-1} \tag{6.138}$$

が得られる．これに積分公式

$$\int_0^\infty dx\ \frac{x^3}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15} \tag{6.139}$$

を代入すると，

$$\rho_{\rm n} = \frac{2\pi^2}{45}\frac{(k_{\rm B}T)^4}{\hbar^3 s^5}. \tag{6.140}$$

他方，$T \gg T_*$ の場合は $\epsilon_{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{p}^2/2m$ である．これを (6.137) へ代入すると，

$$\rho_n = \frac{m(2mk_{\rm B}T)^{\frac{3}{2}}}{4\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty dx\ \frac{\sqrt{x}}{e^x-1}.$$

これに (6.17) の積分公式と (6.18) で $g=1$ とおいた式を使うと，

$$\rho_{\rm n} = mn\left(\frac{T}{T_0}\right)^{\frac{3}{2}} \tag{6.141}$$

が得られる．ここで，T_0 は理想気体のボース–アインシュタイン凝縮の転移温度である．

6.13 巨視的量子現象

磁束の量子化やジョセフソン効果など多くの**巨視的量子現象**は，ミクロな粒子，あるいは，クーパー対のような複合粒子の量子効果が，ボース–アインシュタイン凝縮というメカニズムにより，マクロなレベルに増幅された結果として起こる．ここでは，その典型例である**ジョセフソン効果**について述べよう．

図 6.1 のように，絶縁体が導体にはさまれた構造は**トンネル接合**とよばれ，古典的には電流は流れないが量子力学的なトンネル効果によって電流が流れる．トンネル効果は，左右の導体の電子の波動関数 $\phi^{\rm L}, \phi^{\rm R}$ が，絶縁体中を減衰しながらも反対側の導体へしみ出した結果生じる．全系の電子の波動関数は，左右の導体中の電子の波動関数をそれぞれ $\phi^{\rm L}$, $\phi^{\rm R}$ と書くと近似的に，

$$\Psi(\boldsymbol{r}) = a\phi^{\rm L}(\boldsymbol{r}) + b\phi^{\rm R}(\boldsymbol{r}) \tag{6.142}$$

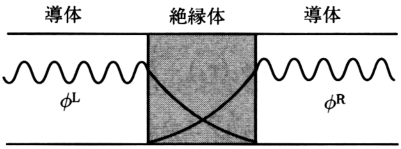


図 6.1 トンネル接合．左右の導体の電子あるいはクーパー対の波動関数 ϕ^L, ϕ^R は絶縁体中で指数関数的に減衰する．

と表せる．ここで，a, b は，条件 $|a|^2 + |b|^2 = 1$ を満足する複素数である．絶縁体付近では $\phi^L(\boldsymbol{r})$ と $\phi^R(\boldsymbol{r})$ が共存し干渉するが，トンネル効果はこの干渉効果の結果であると解釈できる[11)]．左右の導体が超伝導体である場合の接合を**ジョセフソン接合**という．超伝導は，2 個の電子がクーパー対 とよばれる対相関を形成し，これがボース–アインシュタイン凝縮することによって起こる[12)]．左右の電極のクーパー対の波動関数を $\chi^{L,R}$ と書くと，ジョセフソン接合の波動関数は，

$$\Psi^{JJ} = \prod_{i=1}^{N} \left(a\chi^L(\boldsymbol{r}_i) + b\chi^R(\boldsymbol{r}_i) \right) \tag{6.143}$$

と書ける．ここで，N はクーパー対の数，$\boldsymbol{r}_i$ はその重心の座標である (相対座標は本質的ではないので省略している)．(6.143) は，ボース凝縮の結果，すべてのクーパー対が同じ波動関数 $a\chi^L + b\chi^R$ で記述されることを表している．このように，ひとたび超伝導になるとすべてのクーパー対は同じ振舞いをするので，ジョセフソン接合の振舞いは波動関数 $a\chi^L + b\chi^R$ の振舞いを調べることで理解できる[13)]．特に，電流は χ^L と χ^R の干渉効果が BEC のおかげで増幅されるために，電極間の電圧差が 0 でも超伝導電流が流れる．これを (直流) ジョセフソン効果という．(6.143) から明らかのように，ジョセフソン効果は本質的にはクーパー対という電子対のミクロな干渉効果が BEC によってマクロに増幅された結果生じる．

これに対して，BEC を起こした系全体が ϕ_1 か ϕ_2 という 2 つの直交する状

11) 実際，電子が一方の導体から他方の導体へとトンネルする確率振幅は，$\phi^L(\boldsymbol{r})$ と $\phi^R(\boldsymbol{r})$ の干渉の度合いを表す重なり積分とよばれる量で表される．

12) 電子はフェルミオンであるので，そのままでは ODLRO を示せないことを思い出そう．フェルミオンが ODLRO を示すためには，少なくとも 2 粒子が相関をもつ必要がある (6.6 節参照)．

13) これは，次の本で詳しく述べられている．ファインマン，レイトン，ザンズ：「ファインマン物理学 V：量子力学」(岩波書店)．

態をとるという状況も考えられる．この場合に対応する波動関数は，

$$\Psi = a\prod_{i=1}^{N}\phi_1(\boldsymbol{r}_i) + b\prod_{i=1}^{N}\phi_2(\boldsymbol{r}_i) \tag{6.144}$$

で与えられる．6.14 節で述べる**シュレーディンガーの猫状態**はこのような状態に対応している．無論，実際の状況では生きている状態 (あるいは，死んでいる状態) にある猫の原子がすべて同じ状態にボース–アインシュタイン凝縮している必要はないので，猫状態はより一般には次のように書ける．

$$\Psi^{猫} = a\Psi^{生}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N) + b\Psi^{死}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N). \tag{6.145}$$

この状態は，量子情報の分野で**最大限もつれた状態**とよばれる[14)]．

ここで述べた 2 種類の状態 (6.143) と (6.144) (あるいは (6.145)) は，ともに**巨視的な量子状態**とよばれる．前者は本質的に一体 (クーパー対の場合は二体) 量子効果が BEC のおかげでマクロなレベルに増幅されている状況を記述している．ジョセフソン効果，磁束の量子化，循環の量子化などは，この部類に属する．これに対して，後者は多粒子系の量子状態が 2 つの著しく異なった状態 (猫の例では「生きている」状態と「死んでいる」状態) をとりえて，しかも，それらが重ね合わせの状態にある状況を記述している．もつれの度合いに関する曖昧さと同様に，ここでも多粒子系の量子状態が「著しく異なっている」とは何を意味するのかは，一般的には，必ずしも自明ではなく興味深い研究課題である．

問題 6.3 (多体量子状態の安定性) 系の一部の情報が失われることに対して，BEC 状態は安定であるが，猫状態はたった 1 個の粒子に関する情報が失われるだけで壊れてしまうことを，(6.143) と (6.144) を例にとって示せ．

【解答】 系の一部の情報が失われることは，数学的にはその自由度に関して密度演算子のトレースをとることに相当する．N 粒子系の波動関数 $\Psi(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ が与えられたとき，例えば N 番目の粒子の情報が失われた場合の系の密度演算子は次のように書ける．

$$\rho = \int d\boldsymbol{r}_N\ \Psi^*(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_{N-1}, \boldsymbol{r}_N)\ \Psi(\boldsymbol{r}'_1, \cdots, \boldsymbol{r}'_{N-1}, \boldsymbol{r}_N).$$

これに BEC 状態の波動関数 (6.143) を代入して計算すると，

14) もっとも，多粒子系に対する，もつれの度合いを定量的に評価する方法はまだ確立していないので，「最大限」という言葉の意味は必ずしも明確ではない．

$$\rho = \left[\Psi^{\mathrm{JJ}}(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_{N-1})\right]^* \Psi^{\mathrm{JJ}}(\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_{N-1}).$$

これは，$N-1$ 個の粒子 (この例ではクーパー対) が BEC 状態にあるときの密度演算子に他ならない．このように，BEC 状態は情報の損失に対して安定である．他方，猫状態の波動関数 (6.144) を代入すると，

$$\rho = |a|^2 \prod_{i=1}^{N-1} \phi_1^*(\boldsymbol{r}_i)\phi_1(\boldsymbol{r}'_i) + |b|^2 \prod_{i=1}^{N-1} \phi_2^*(\boldsymbol{r}_i)\phi_2(\boldsymbol{r}'_i)$$

となるが，これは猫状態の波動関数の積には分解できない．これは，1 粒子の情報が失われるだけで猫状態が壊れてしまうことを意味している． ∎

6.14 シュレーディンガーの猫のパラドックス ―― 重ね合わせの原理の帰結 ――

シュレーディンガーの猫のパラドックスは，状態の時間発展を記述するユニタリー演算子 $\hat{U}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$ が**線形**であることから生じる．$\hat{U}$ が線形であるとは，$\hat{U}\phi_1 = \Psi_1$, $\hat{U}\phi_2 = \Psi_2$ であれば，任意の複素数 a, b に対して，$\hat{U}(a\phi_1 + b\phi_2) = a\Psi_1 + b\Psi_2$ が成立すること意味する．いま，観測したい系とそれを測定する測定器の初期状態をそれぞれ ϕ_i, X_0 とし，$\hat{U}$ が系と測定器の時間発展を記述する演算子であるとしよう．理想的な測定では，相互作用の後，系の状態と測定器の状態が 1 対 1 に対応する．すなわち，

$$\hat{U}\phi_i X_0 = \phi_i X_i. \tag{6.146}$$

左辺は，観測前の測定器の状態はいつも同じ状態 X_0 にリセットされていることを表している．右辺は，測定後の測定器の状態が系の状態 ϕ_i に対応した状態 X_i になることを表している．このような理想測定を仮定すると，測定前の系の状態が重ね合わせの状態 $\sum_i c_i\phi_i$ にある場合は，$\hat{U}$ の**線形性**より測定後の状態は，

$$\hat{U}\left(\sum_i c_i\phi_i\right) X_0 = \sum_i c_i\phi_i X_i \tag{6.147}$$

となる．右辺は，巨視的な測定器の状態 X_i が重ね合わせの状態にあることを意味している．

このように，量子力学的時間発展の線形性をマクロな世界に外挿すれば，日常経験[15] からはありえないと思われる巨視的状態の重ね合わせの状態が必然

---

15) 素朴な日常経験からは，巨視的に区別できる状態 (例えば猫が生きている状態と死んでいる状態) の重ね合わせの状態 ―シュレーディンガーの猫状態― は不可能であると考えられる．このような立場を，**巨視的実在論**という．

的に導かれる．これが**シュレーディンガーの猫のパラドックス**の本質である．

このようなパラドックスが生じたのは線形性を要請したからであり，それが破れているのではないかという反論も考えられる．しかし，時間発展の線形性が破れると，量子状態を**複製** (**クローン**) することが可能になり，それを使って不確定性原理を破ったり光速を超えた通信が可能となる[16]．したがって，これらの原理が互いに無矛盾であるためには，巨視的状態の重ね合わせは避けられないと思われる．時間発展の線形性，不確定性原理，そして光速度不変の原理という物理の基本原理が互いに独立ではなく，1 つが破れると残りもだめになってしまうという事実は一体何を意味しているのだろうか．筆者には，背後により深い物理が隠れているように思われる．

問題 6.4 量子状態の時間発展の線形性を仮定すると，未知の状態を複製 (クローン) することが不可能であることを示せ (既知の状態を複製することは可能である).

【解答】 背理法で証明する．未知の状態を複製できる線形な演算子 $\hat{U}$ が存在すると仮定しよう．すると，未知の状態 φ, ψ に対して，

$$\hat{U}\varphi = \varphi \otimes \varphi, \qquad \hat{U}\psi = \psi \otimes \psi$$

が成立する．φ と ψ の重ね合わせの状態 $a\varphi + b\psi$ に対しては，$\hat{U}$ の線形性より

$$\hat{U}(a\varphi + b\psi) = a\varphi \otimes \varphi + b\psi \otimes \psi. \qquad (*)$$

他方，$\hat{U}$ は $a\varphi + b\psi$ を複製するので

$$\hat{U}(a\varphi + b\psi) = (a\varphi + b\psi) \otimes (a\varphi + b\psi) \qquad (**)$$

となるが，(∗) と (∗∗) は $ab \neq 0$ の場合は両立しない． ∎

それでは，日常の世界で巨視的状態の重ね合わせが見られないのはなぜかという疑問がわく (ただし，6.15 節で述べるように実験室では最近そのような状態がつくられはじめている)．これに対する 1 つの答えは，巨視的な系はそれを取り巻く**環境**と強い相互作用を行い，その結果，重ね合わせの状態が壊れてしまうというものである．これを**デコヒーレンス**という．デコヒーレンスのメカニズムは，個々の系の具体的な性質に依存するために一概に論じることはでき

16) W. K. Wootters and W. H. Zurek, Nature **299**, 802 (1982); D. Dieks, Phys. Lett. A **92**, 271 (1982). これと相補的な定理として，最近，未知の量子状態を消去することができないことが示された．A. K. Pati and S. L. Braunstein, Nature **404**, 164 (2000).

ない．しかし，量子計算を行ううえでは，重ね合わせの状態を長く続かせることが重要で，そのため，デコヒーレンスの原因を解明しそれを回避あるいは除去しようとする研究が現在のホットなトピックスとなっている．

6.15 巨視的量子コヒーレンス

超伝導量子干渉デバイス (Superconducting Quantum Interference Device，略して SQUID) という素子を使った，巨視的量子状態の重ね合わせの状態が 2000 年に実現された[17]．SQUID はジョセフソン接合を含む超伝導のリングであり，リングを貫く磁束が磁束量子 $\Phi_0 = h/2e$ の半分のときには，超伝導電流がリングの一方向に回る状態 Ψ_1 と反対方向に回る状態 Ψ_2 がエネルギー的に縮退する．状態 Ψ_1 と Ψ_2 では，巨視的な数のクーパー対が反対方向に回っており，これらの状態は SQUID を貫く磁束を観測することにより識別できる．これら巨視的に識別できる状態の重ね合わせの状態は，状態 (6.144) に対応しており，シュレーディンガーの猫状態といえる．

ジョセフソン接合は，超伝導リングに沿った並進対称性を破るので，リング方向の運動量の固有状態である Ψ_1，Ψ_2 は，ハミルトニアンの固有状態ではなくなる (2.1 節参照)．Ψ_1 と Ψ_2 から構成されるエネルギー固有状態は，第 5 章で述べたように一般に，

$$\Psi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha\Psi_1 \pm \beta\Psi_2) \tag{6.148}$$

と書ける ($|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$)．$\Psi_+$ に対応する固有エネルギー E_+ は，Ψ_- に対応する固有エネルギー E_- よりも低くなる．そこで，エネルギーの差 $E_- - E_+$ に相当する電磁波を照射すると，巨視的な 2 準位間にラビ振動が起こり，共鳴的な吸収が観測されるものと予測される．フリードマンらとヴァールらは，実際にそのような共鳴信号をとらえることに成功した[17]．

巨視的な量子状態の重ね合わせは**巨視的量子コヒーレンス**とよばれ，1980 年代初頭から探し求められてきたが，20 年の努力の末についに観測された．今後

17) Jonathan R. Friedman, Vijay Patel, W. Chen, S. K. Tolpygo, and J. E. Lukens, Nature **406**, 43 (2000); Caspar H. van der Wal, A. C. J. ter Haar, F. K. Wilhelm, R. N. Schouten, C. J. P. M. Harmans, T. P. Orlando, Seth Lloyd, and J. E. Mooij, Science **290**, 773 (2000). ラビ振動は次の文献で報告されている．I. Chiorescu, Y. Nakamura, C. J. P. Harmans, and J. E. Mooij, Science **299**, 1869 (2003).

は，これらやボース–アインシュタイン凝縮の実験に刺激されて巨視的量子現象の研究が進展し，その過程で思いもよらなかった新しい現象が発見されるものと期待される．

6.16 レゲット–ガーグの不等式

1.3 節で述べたように，量子力学では観測するまでは実在というものを考えてはならず，確率振幅という情報のみが存在する．これは，測定するまでは物理量が決まった値をもたないことを意味している．これに対して，日常世界では，巨視的物体の観測量は，我々が観測するしないにかかわらず決まった値をもっているという立場もある．これを**巨視的実在論**という．アインシュタインは散歩の途中でかたわらの友人に，「月は私が見ているときだけ存在すると思いますか？」と尋ねたといわれるが，これは巨視的実在論の立場を端的に表しているいえよう．

ミクロな世界は量子力学に従っているにもかかわらず，日常的なスケール (~1 m) の巨視的物体が重ね合わせの状態にあることを見た人はいない (前節の超伝導リングの大きさは，ミクロとマクロの中間の**メゾスコピック**なスケール (~1 μm) である)．我々にとって確実だと思われる日常経験は，原子の世界を記述する法則として誕生した量子力学が，果たしてどこまで巨視的な領域へ外挿できるのかという根本的な疑問をいだかせる．

残念ながら，このような根本的な疑問は多くの場合，明快な答えをもたない．その理由は，答えを見出せないというよりもむしろ，もっともらしい「答え」がありすぎて，どれが真相かの見極めがつかないからである．その代表例が環境との相互作用によるデコヒーレンスである．これによると，巨視系は必然的に環境と相互作用せざるを得ず，その結果，重ね合わせの状態がミクロな時間スケールで事実上壊れてしまうというものである．しかし，デコヒーレンス仮説は，量子効果が巨視系では実際上は現れないと主張しているだけで，アインシュタインの疑問に本質的な答えを与えているわけではない．

おそらく，より真相をついている答えは，巨視的物体は実際に量子力学的な状態にありうるが，それを観測するために適したオブザーバブルを我々はもたないということであろう．具体的に，N 粒子系の互いに直交する 2 つの状態 $\Psi_i(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ $(i = 1, 2)$ を考えよう．これらの状態の干渉効果を観測する

ためには，あるオブザーバブル $\hat{O}$ が存在して，それに対する次の行列要素が 0 でない値をもたなければならない．

$$\int \Psi_1^*(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)\hat{O}\Psi_2(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)\, d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \cdots d\boldsymbol{r}_N \neq 0. \quad (6.149)$$

ところが，相互作用をしている多粒子系では，N 粒子全体がもつれた状態にあるために，そのようなオブザーバブルを構成することは特別な場合を除き困難である．

おそらく最も厄介な疑問は，そのような干渉効果が観測されたとして，それが量子力学によって記述されるだけではなく，巨視的実在論によっても同じ結果が再現されるのではないかというものである．そこで，ある現象が後者ではなく前者によってのみ説明可能であるような基準は何かという問題が生じる．それに対する 1 つの答えが**レゲット-ガーグの不等式**である[18)]．この不等式は次にあげる 3 つの前提のうえに成立する．

- **巨視的実在論**：巨視系が，巨視的に区別できる 2 個以上の状態をとりうる場合，観測するしないにかかわらず，系は各瞬間ごとにどれか 1 つの状態にある．
- **帰納性**：ある時刻におけるアンサンブルの性質は，その時刻以前の条件には依存するがその時刻における測定にはよらない．この仮定が成立すると，観測結果が被測定系そのものの性質であるとみなすことができる．
- **非破壊測定が可能であること**：これは次のことを意味している．時刻 $t = 0$ で系が状態 A (状態 B) に見出される確率を p_A (p_B) とする．そして，時刻 $t > 0$ で 2 回目の測定を行った場合に，系が状態 C に見出される条件つき確率を $P(C|A)$ ($P(C|B)$) と書こう．また，時刻 $t = 0$ で測定を行わなかった場合に，時刻 t で系が状態 C に見出される確率 $P(C)$ と書く．このとき，次の関係式が成立するものと仮定する．

$$P(C) = P(C|A)p_A + P(C|B)p_B.$$

すなわち，測定行為は系の統計性に影響を与えない．

議論を簡単にするため，巨視的物体がとりうる状態が 2 つしかなく，これらに対応して観測量 Q のとりうる値が $+1$ または -1 であるとしよう．時刻

18) A. J. Leggett and A. Garg, Phys. Rev. Lett. **54**, 857 (1985).

$t_1 < t_2 < t_3 < t_4$ において Q を観測した測定値を Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 とし，これらの値が得られる確率を $P(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4)$ としよう．このとき，時刻 t_1, t_2 における測定値の相関関数は次のように定義される．

$$\begin{aligned} K_{12} &= \langle Q_1 Q_2 \rangle \\ &\equiv \sum_{Q_1, Q_2, Q_3, Q_4 = \pm 1} Q_1 Q_2 \, P(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4). \end{aligned} \tag{6.150}$$

他の相関関数 $K_{13}, K_{14}, K_{23}, K_{24}$ も同様に定義される．このとき，次の不等式が成立する．

$$1 + K_{12} + K_{23} + K_{13} \geq 0, \tag{6.151}$$

$$|K_{12} + K_{23} + K_{34} - K_{14}| \leq 2. \tag{6.152}$$

これらを**レゲット-ガーグの不等式**という．

証明は次のようにしてなされる．$Q_i^2 = 1$ に着目すると，

$$|Q_1 Q_3 + Q_2 Q_3| = |(Q_1 Q_3 + Q_2 Q_3) Q_2 Q_3| = Q_1 Q_2 + 1.$$

よって，

$$-(Q_1 Q_3 + Q_2 Q_3) \leq Q_1 Q_2 + 1.$$

この両辺に $P(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4)$ を掛けて平均すれば (6.151) が得られる．同様にして，

$$\begin{aligned} |Q_1 Q_2 + Q_2 Q_3| &= |(Q_1 Q_2 + Q_2 Q_3) Q_2 Q_3| = |Q_1 Q_3 + 1| = 1 + Q_1 Q_3, \\ |Q_1 Q_4 - Q_3 Q_4| &= |(Q_1 Q_4 - Q_3 Q_4) Q_3 Q_4| = |Q_1 Q_3 - 1| = 1 - Q_1 Q_3. \end{aligned}$$

よって，

$$|Q_1 Q_2 + Q_2 Q_3 - (Q_1 Q_4 - Q_3 Q_4)| \leq 2.$$

両辺に $P(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4)$ を掛けて平均すれば (6.152) が得られる．

さて，系が 2 つの状態をとり，それらの間をコヒーレントにラビ振動する場合を考えよう．このとき，相関関数は，

$$K_{ij} = \cos \Omega (t_i - t_j) \tag{6.153}$$

で与えられる．時間間隔を $t_{i+1} - t_i = 3\pi/4\Omega$ と選べば，(6.151) の左辺は $1 - \sqrt{2}$ となり不等式は破れる．また，$t_{i+1} - t_i = \pi/4\Omega$ と選べば，(6.152) の左辺は $2\sqrt{2}$ となりやはり不等式は破れる．

超伝導リングを用いてこのことが実現できるという提案が，テシェによりなされている[19]．実験技術の急速な進展[17]を考えると，レゲット-ガーグの不等式がメゾスコッピクなスケールで破られることは時間の問題と思われる．実験技術がさらに進めば，日常的なスケールでレゲット-ガーグの不等式の検証が可能になるかもしれない．そのときには，我々は，アインシュタインが月に例えた量子論と巨視的実在論の深刻な相克に直面することになるだろう．

19)　C. D. Tesche, Phys. Rev. Lett. **64**, 2358 (1990).

7. 量子情報

7.1 量子ビット

量子情報の分野では，量子力学的 2 準位系は，**量子ビット**あるいは quantum bit の頭文字をとって**キュービット**とよばれる．これに対して，重ね合わせの状態をもたない古典的 2 準位系は，**古典ビット**あるいは classical bit の頭文字をとって**シービット**とよばれる．

キュービットのヒルベルト空間は 2 次元であり，第 5 章で記述した上準位 $|\mathrm{u}\rangle$ と下準位 $|\mathrm{d}\rangle$ で表される．量子情報の分野では，これらをそれぞれ $|\mathrm{u}\rangle = |0\rangle$, $|\mathrm{d}\rangle = |1\rangle$ と表記する．$|0\rangle, |1\rangle$ で表現された基底は**計算基底**とよばれる．

キュービットに対するあらゆる演算は，2 行 2 列の単位行列 $\hat{I}$ と**パウリ行列** $\hat{\sigma}_i$ $(i = x, y, z)$

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.1}$$

を用いて表現できる．基底ベクトル $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ を $\hat{\sigma}_z$ の固有値 ± 1 の固有状態

$$\hat{\sigma}_z|0\rangle = |0\rangle, \quad \hat{\sigma}_z|1\rangle = -|1\rangle \tag{7.2}$$

となるように選ぶと，$|0\rangle, |1\rangle$ はそれぞれ

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{7.3}$$

で与えられる．このとき，基底状態は z 軸方向を向いているといわれる．

キュービットがシービットと異なる点は，$|0\rangle$ と $|1\rangle$ の任意の重ね合わせの状態

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \tag{7.4}$$

がつくれる点にある．ここで，α, β は規格化条件 $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ を満足する複素数である．このように，キュービットの状態は 2 次元の複素単位ベクトルとして表すことができる．

状態ベクトルは，規格化条件からその大きさは常に 1 に保たれ，向きだけを変えることができる．その方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{n} = (n_x, n_y, n_z)$ と書くと，スピン演算子の $\boldsymbol{n}$ 方向への射影は，

$$\begin{aligned} \hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}} &= \boldsymbol{n} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z \\ &= \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{7.5}$$

で与えられる．状態ベクトル $|\Psi\rangle$ がベクトル $\boldsymbol{n}$ の正の方向を向いているとは，これが固有値方程式

$$\hat{\sigma}_{\boldsymbol{n}}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle \tag{7.6}$$

を満足することを意味する．(7.4) と (7.5) を (7.6) に代入すると，

$$n_x = 2|\alpha|^2 \mathrm{Re}\frac{\beta}{\alpha}, \qquad n_y = 2|\alpha|^2 \mathrm{Im}\frac{\beta}{\alpha}, \qquad n_z = |\alpha|^2 - |\beta|^2 \tag{7.7}$$

が得られる．波動関数全体にかかる位相は一般性を失うことなく任意にとれることを利用すると，α は実数にとることができるので，規格化条件を満足するように α と β を

$$\alpha = \cos\frac{\theta}{2}, \qquad \beta = e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} \tag{7.8}$$

とおくと，

$$\left.\begin{aligned} n_x &= \sin\theta\cos\phi = \langle\Psi|\hat{\sigma}_x|\Psi\rangle, \\ n_y &= \sin\theta\sin\phi = \langle\Psi|\hat{\sigma}_y|\Psi\rangle, \\ n_z &= \cos\theta = \langle\Psi|\hat{\sigma}_z|\Psi\rangle \end{aligned}\right\} \tag{7.9}$$

となる．これから，状態

$$|\Psi\rangle = \cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle \tag{7.10}$$

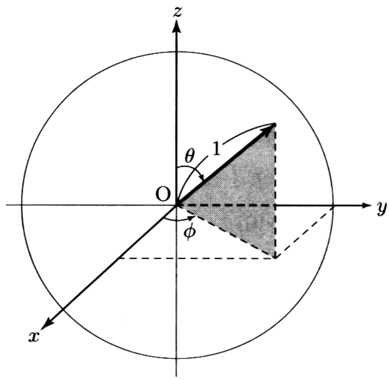


図 7.1 キュービットの状態 $|\Psi\rangle$ のブロッホ球面上での表示．ブロッホ球の半径は 1 である．この表示では，キュービットの状態は天頂角が θ，方位角が ϕ の方向を向いている単位ベクトルとして表されている．

は極座標表示で，天頂角が θ，方位角が ϕ の方向を向いている単位ベクトルとして表されることがわかる．キュービットの状態を図 7.1 のように極座標表示することを量子情報の分野では，**ブロッホ球面**上での表示という．

一般のキュービットの状態は，2 行 2 列の**密度行列**

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{00} & \rho_{01} \\ \rho_{10} & \rho_{11} \end{pmatrix}, \qquad \rho_{00} + \rho_{11} = 1 \tag{7.11}$$

で表される．特に，系が純粋状態 $|\Psi\rangle$ であるときは，密度行列は $\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ で与えられるので，**冪**(べき)**等条件**

$$\hat{\rho}^2 = \hat{\rho} \tag{7.12}$$

が成立する．

7.2 量子ビットのパワー

重ね合わせの原理

一般に情報は 0 と 1 の文字列によって表現される．n ビットの文字列 $001011\cdots01$ を記録する媒体をサイズ n の**レジスター**という．例えば，サイズが 2 のレジスターは，0 から 3 までの $2^2 = 4$ 種類の整数を 2 進数で記録

することができる．古典ビットは，各時刻ごとに，0 から 3 までの整数のうちどれか 1 つのみを記録することができる．これに対して，量子レジスターは重ね合わせとして複数の状態を同時に記録することができる．いま，10 進数で表した状態を $|a)$ と書くと，$a = 0, 1, 2, 3$ は 2 キュービットのテンソル積として次のように表現できる．

$$\left.\begin{aligned} |0) &= |0\rangle \otimes |0\rangle, \qquad |1) = |0\rangle \otimes |1\rangle, \\ |2) &= |1\rangle \otimes |0\rangle, \qquad |3) = |1\rangle \otimes |1\rangle. \end{aligned}\right\} \tag{7.13}$$

同様に，n キュービットのテンソル積は，$a = 0, 1, 2, \cdots, 2^{n-1}$ の 2^n 個の状態の基底を張る．すなわち，

$$a = 2^{n-1}a_{n-1} + 2^{n-2}a_{n-2} + \cdots + 2^1 a_1 + 2^0 a_0 \qquad (a_i \in \{0, 1\}) \tag{7.14}$$

に対応する基底は，

$$|a) = |a_{n-1}\rangle \otimes |a_{n-2}\rangle \otimes \cdots \otimes |a_1\rangle \otimes |a_0\rangle \tag{7.15}$$

である．これは，古典ビットの場合も同じであるが，量子ビットは次のような重ね合わせの状態が一度に表現できるというメリットがある．

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1) + |3)), \tag{7.16}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_{n=0}^{3} |n). \tag{7.17}$$

このように，テンソル積で表される状態が，重ね合わせの状態を許すことが量子ビットの威力の 1 つになっている．これを**量子並列性**という．これが，計算の効率をどのくらい向上させるかを理解するために，次のような n キュービットの状態を考えよう．

$$\prod_{i=1}^{n} \otimes \frac{|0\rangle_i + |1\rangle_i}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{a=0}^{2^n-1} |a). \tag{7.18}$$

この状態に対して次のような変換を考える．

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{a=0}^{2^n-1} |a) \longmapsto \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{a=0}^{2^n-1} (-1)^a |a). \tag{7.19}$$

この操作は，古典計算機では 2^n 回の操作が必要であるが，量子計算では n 番目のビットに対して，

$$|0\rangle_n \longmapsto |0\rangle_n, \qquad |1\rangle_n \longmapsto -|1\rangle_n \tag{7.20}$$

という 1 回の操作をするだけで (7.19) が実行できる．このように，量子計算機は古典計算機と比較して，指数関数的に少ないステップ数で計算が実行できる場合がある．

量子計算機は，重ね合わせの原理と状態の時間発展の線形性により，古典計算機では不可能な並列処理が可能である．しかし，最後に状態を観測する際に，古典論にはない確率的要素が入ってくる．したがって，所望の計算結果をできるだけ高い確率で取り出せるようにアルゴリズムを工夫する必要がある (7.10 節参照)．また，そのようなアルゴリズムが見つかったとしても，正しい答えを得る確率が 1 となる場合はまれである．それゆえ，量子計算は答えを見つけるのは困難だが，与えられた答えが正しいかどうかを検算することが容易な問題を解く場合に有効であるといえる．

状態のもつれと非局所相関

話を具体的にするために，スピン 0 の原子がスピン $\hbar/2$ をもった 2 つの原子 A, B に分裂する状況を考えよう．全系のスピンは保存するので，分裂した 2 原子のスピンの状態は，依然として全スピンが 0 の**スピンシングレット対**であり，原子 A のスピンが上向き (下向き) であれば原子 B のスピンは下向き (上向き) である．これらの相関はスピン角運動量保存則の帰結であり，古典論でも存在する．量子論に特有なことは，測定が行われるまではスピンの向きは決まらず，重ね合わせの状態にあるということにある．スピンの量子化軸を z 軸にとり，上向きスピンの状態を $|\uparrow\rangle$，下向きスピンの状態を $|\downarrow\rangle$ で表すと，全系の状態は次のように表される．

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{\mathrm{A}}|\downarrow\rangle_{\mathrm{B}} - |\downarrow\rangle_{\mathrm{A}}|\uparrow\rangle_{\mathrm{B}}). \tag{7.21}$$

ここで，右辺のマイナス符号は，スピン 1/2 をもった粒子はフェルミ統計に従い，全系の波動関数が粒子の交換に関して反対称 (すなわち符号を変える) でなければならないという要請から生じる (座標部分は対称であると仮定する)．

分裂後は時間がたつにつれて原子は互いに空間的に離れていくが，原子の状態が測定されるまでは，原子 A と B は (7.21) のような重ね合わせの状態にあり，原子 A の状態ベクトル $|\Psi_{\mathrm{A}}\rangle$ と原子 B の状態ベクトル $|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$ の積の形 $|\Psi_{\mathrm{A}}\rangle|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$ に書くことはできない．これを，状態の**非分離性**といい，このような状態は**もつれた状態**あるいは**エンタングルした状態**といわれる．もつれた状態

にある原子のスピンの向きは，観測するまでは確定していないが，原子 A の状態を測定した瞬間に，それとは空間的に離れた原子 B の状態が確定するという驚くべき性質をもっている．このような空間的に離れた場所の相関を**非局所相関**または，それを最初に指摘した人々の名前にちなんで**アインシュタイン–ポドルスキー–ローゼン相関**，略して **EPR 相関**とよばれる[1)]．また，(7.21) で記述される状態にある粒子対は **EPR ペアー**とよばれる．

しかし，これに対しては次のような反論が想定される．すなわち，原子 A と B の状態はそれらが局所的な相互作用を終えた時点，すなわち，原子が 2 つに分裂した時点で確定しているのであるが，ただ，何らかの理由で確率的要素が加わってしまっているために測定結果が確率的に変化するだけである，という解釈である．これを局所的な**隠れた変数理論**とよばれ，「隠れた」変数が我々の関知できない確率的要素をもち込む役割を果たす．

非局所的な相関を予言する量子論と，相関が局所に生じることを主張する局所的隠れた変数理論[2)]のどちらが正しいかを調べるために，スピンを測定する軸を x 軸にとり，測定結果が x 軸の正の向きに対応する状態を $|+\rangle$，負の向きに対応する状態を $|-\rangle$ と記そう．これらは，測定軸を z 軸にとった基底と次の関係で結ばれている．

$$|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \quad |-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle). \tag{7.22}$$

これらを逆に解いた式

$$|\uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle), \quad |\downarrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle) \tag{7.23}$$

も (7.21) に代入すると，

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|-\rangle_{\mathrm{A}}|+\rangle_{\mathrm{B}} - |+\rangle_{\mathrm{A}}|-\rangle_{\mathrm{B}}) \tag{7.24}$$

が得られる．この結果は，原子 A のスピンが x 軸の負 (正) の方向を向いていると，原子 B のスピンは正 (負) の方向を向いているという，完全な反相関が測定軸を変えても依然として成立していることを示している．もし，相互作用

---

1) A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen, Phys. Rev. **47**, 777 (1935).

2) これに対して，D. Bohm は，相関の起源の非局所性を認める非局所的な隠れた変数理論を提案した (Phys. Rev. **85**, 166, 180 (1952))．この理論は，量子力学と同じ観測結果を予言し，したがって，実験結果と矛盾しない．

が終わった時点でスピンの向きが確定しているのならば，相互作用が終わった後に測定軸の向きを変えると測定結果にこのような完全な反相関は現れない．

このように，2つの系の間にひとたび量子相関ができると，一方の系に操作を加えることによって，空間的に離れたもう一方の系の状態を瞬時に変化させることができる[3)]．これが，EPR のパラドックスの本質である．また，相互作用が終了した後にスピンの測定軸を自由に選択しても (これを**遅延選択**という)，その軸に関する完全な反相関が保たれている．

以上の結果は，我々の直感と鋭く対立するが，実験によって正しいことが確かめられている．したがって，局所的な隠れた変数理論は否定され (7.6 節参照)，量子論の予言する非局所相関が確かめられた[4)]．遅延選択の実験は，「測定が行われるまでは実在というものを考えてはいけない，確率振幅という情報のみが存在する」と主張するコペンハーゲン解釈の正しさを印象深く示している．実験結果の奇妙さ，不思議さを解き明かしてくれる明快な説明を我々はいまだもたないが，非局所相関の存在は疑いようがない．

興味深いことに EPR 相関や非局所性は，アインシュタインらが量子論に内在する奇妙な性質として指摘し，それゆえに量子論を最終理論として受け入れられない根拠としてあげたものである．しかし，現在ではこれらの性質は古典的には存在しない量子情報処理の最も重要なリソースとみなされている．

7.3 量子ゲート

量子情報処理は，1 キュービットあるいは 2 キュービットに作用してユニタリー変換を行う**量子ゲート**とよばれる基本的な素子の組み合わせで実行できる．ここでは，代表的な量子ゲートを紹介しよう．

アダマールゲート

アダマールゲート $\hat{H}$ は行列表示で，

3) しかし，観測したスピンの向きが上向きか下向きかは全くランダムなので，この性質を利用して光速よりも速い通信をすることはできない (7.4 節参照)．

4) 現在では，これら非局所相関は数十キロ離れてなお存在することが実験的に確かめられている．例えば，W. Tittel, J. Brendel, B. Gisin, T. Herzog, H. Zbinden, and N. Gisin, Phys. Rev. A **57**, 3230 (1998).

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \tag{7.25}$$

と表されるユニタリーゲートであり，計算基底を次のように変換する.

$$\hat{H}|0\rangle = \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}}, \qquad \hat{H}|1\rangle = \frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}}. \tag{7.26}$$

一般の入力 $|x\rangle$ $(x \in \{0,1\})$ に対して，アダマールゲートの演算は次のようにまとめることができる.

$$\hat{H}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|0\rangle + (-1)^x|1\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{y=0,1}(-1)^{xy}|y\rangle. \tag{7.27}$$

さらに，$\hat{H}$ そのものがブラケットの記号を用いて，次のように表されることがわかる.

$$\hat{H} = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{x,y=0,1}(-1)^{xy}|x\rangle\langle y|. \tag{7.28}$$

これから，(7.15) のおのおののビットにアダマールゲートを作用させると，キュービットの状態は次のように変換されることがわかる.

$$|a) = \prod_{i=0}^{n-1}\otimes|a_i\rangle \longmapsto \frac{1}{\sqrt{2^n}}\sum_{x\in\{0,1\}^n}(-1)^{a\cdot x}|x). \tag{7.29}$$

ここで，$x = 2^{n-1}x_{n-1} + \cdots + 2^1x_1 + 2^0x_0$ $(x_i \in \{0,1\})$ であり，$x \in \{0,1\}^n$ はすべての i $(i = 0, 1, \cdots, n-1)$ について，$x_i = 0, 1$ の和をとることを意味する．また，$a \cdot x \equiv a_{n-1}x_{n-1} + \cdots + a_1x_1 + a_0x_0$ である．特に，すべての成分が 0 である n キュービット $|0, 0, \cdots, 0\rangle$ に作用させると，10 進数で 0 から $2^n - 1$ までのすべての状態を等しい重みで重ね合わせた状態が得られる．これを 3 キュービットの場合について確かめてみよう.

$$\begin{aligned} |0,0,0\rangle \longmapsto\ & \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \otimes \frac{|0\rangle + |1\rangle}{\sqrt{2}} \\ =\ & \frac{1}{\sqrt{2^3}}(|0,0,0\rangle + |0,0,1\rangle + \cdots + |1,1,1\rangle) \\ =\ & \frac{1}{\sqrt{2^3}}\sum_{a=0}^{7}|a). \end{aligned} \tag{7.30}$$

一般には，

$$|0, 0, \cdots, 0\rangle \longmapsto \frac{1}{\sqrt{2^n}}\sum_{a=0}^{2^n-1}|a) \tag{7.31}$$

である.

アダマールゲートは図 7.2 のように図示される.

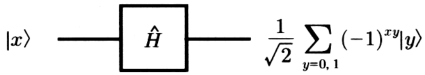


図 7.2 アダマールゲート

位相ゲート

位相ゲート $\hat{\Phi}$ は，行列表示で次のような演算を行う.

$$\hat{\Phi}(\phi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\phi} \end{pmatrix}. \tag{7.32}$$

$\hat{\Phi}(\phi)|0\rangle = |0\rangle$，$\hat{\Phi}(\phi)|1\rangle = e^{i\phi}|1\rangle$ なので，位相ゲートは図 7.3 のように図示される.

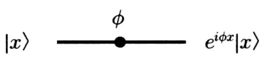


図 7.3 位相ゲート

アダマールゲートと位相ゲートを組み合わせると，1 キュービットに対する任意のユニタリー変換を実行することができる．具体的には，図 7.4 のように両者を組み合わせた回路をつくる (演算は図では左から右へ順番に行う).

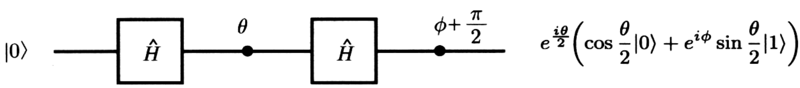


図 7.4 任意の 1 キュービットに対するユニタリー変換

これに対応する演算は行列表示で行うと (行列では右から順に演算させる),

$$\begin{aligned} \hat{U}(\theta,\phi) &= \hat{\Phi}\left(\phi+\frac{\pi}{2}\right)\hat{H}\hat{\Phi}(\theta)\hat{H} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\left(\phi+\frac{\pi}{2}\right)} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \\ &= e^{\frac{i\theta}{2}} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2} & ie^{i\phi}\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{7.33}$$

となる．したがって，

$$\hat{U}(\theta,\phi)|0\rangle = e^{i\frac{\theta}{2}}\left(\cos\frac{\theta}{2}|0\rangle + e^{i\phi}\sin\frac{\theta}{2}|1\rangle\right) \equiv |\theta,\phi\rangle \tag{7.34}$$

となり，任意の 1 キュービット状態 (7.10) が実現される (全体にかかる位相 $e^{i\frac{\theta}{2}}$ は任意にとれるので本質的ではない)．

同様に，おのおののキュービット $|0\rangle_i$ に別々の $\hat{U}$ を作用させることにより，n キュービットの任意の直積状態をつくることができる．

$$\prod_i \otimes\ \hat{U}(\theta_i,\phi_i)|0\rangle_i = \prod_i \otimes |\theta_i,\phi_i\rangle. \tag{7.35}$$

しかし，アダマールゲートと位相ゲートだけではエンタングルした状態をつくることはできない．これを作り出すゲートが次の制御 NOT ゲートである．

制御 NOT ゲート

制御 NOT ゲートは，図 7.5 に示されているように**制御キュービット**と**標的キュービット**からなり，制御キュービットの値 x が 0 のときは標的キュービットの値 y は変わらず，$x=1$ のときは標的キュービットの値 y は反転する ($1-y$ になる)．図 7.5 で，$x\oplus y$ は**排他的論理和**または**法が 2 の加法**を表し，$x=y=1$ および $x=y=0$ のときは 0，$x=1$，$y=0$ および $x=0$，$y=1$ のときは 1 を与える．制御 NOT ゲートの入出力は次のように書ける．

$$|x\rangle|y\rangle \longmapsto |x\rangle|x\oplus y\rangle. \tag{7.36}$$

(7.36) から標的キュービットの初期値を 0 にしておくと，制御 NOT ゲートは，制御キュービットの値を標的キュービットの値へコピーする役割を果たす．

$$|x\rangle|0\rangle \longmapsto |x\rangle|x\rangle \qquad (x=0,1). \tag{7.37}$$

ただし，このようなコピーが可能なのは，制御キュービットの入力が 0 または

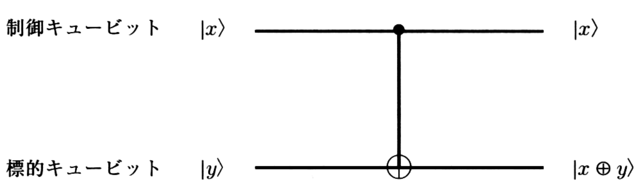


図 7.5 制御 NOT ゲート

1 の場合に限ることに注意しよう．7.4 節で示されるように，量子力学では未知の状態を複製 (クローン) することはできない．実際，制御キュービットが重ね合わせの状態 $\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ にある場合，制御 NOT ゲートはこれを複製した状態

$$(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) \tag{7.38}$$

をつくるのではなく，(7.36) から

$$(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)|0\rangle \longmapsto \alpha|0\rangle|0\rangle + \beta|1\rangle|1\rangle \tag{7.39}$$

のように，直積状態では書けないエンタングルした状態を作り出す．

図 7.6 のように，制御 NOT ゲートを 3 個並べることにより，制御キュービットと標的キュービットの状態を交換する**交換ゲート**を構成することができる．実際，$x \oplus x = 0$ であることに注意すると，図 7.6 のおのおのの制御 NOT ゲートによって，入力状態 $|x, y\rangle$ は次のように変換される．

$$\begin{aligned} |x, y\rangle &\longmapsto |x, x \oplus y\rangle, \\ &\longmapsto |x \oplus (x \oplus y), x \oplus y\rangle = |y, x \oplus y\rangle, \\ &\longmapsto |y, (x \oplus y) \oplus y\rangle = |y, x\rangle. \end{aligned} \tag{7.40}$$

すなわち，

$$|x\rangle|y\rangle \longmapsto |y\rangle|x\rangle \tag{7.41}$$

が得られる．

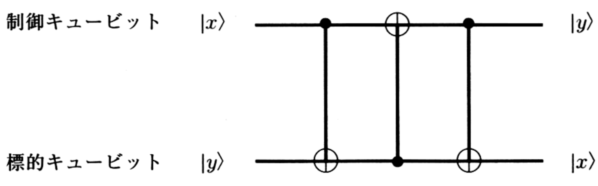


図 7.6 交換ゲート

問題 7.1 交換ゲートは任意の 2 つの状態を交換すること，すなわち，

$$|\psi\rangle|\phi\rangle \longmapsto |\phi\rangle|\psi\rangle \tag{7.42}$$

であることを証明せよ．

【解答】 入力状態は一般に,

$$
\begin{aligned}
|\psi\rangle|\phi\rangle &= (a|0\rangle + b|1\rangle)(c|0\rangle + d|1\rangle) \\
&= ac|0,0\rangle + ad|0,1\rangle + bc|1,0\rangle + bd|1,1\rangle
\end{aligned}
\tag{7.43}
$$

と書ける.量子力学の時間発展は線形なので,交換ゲートの性質 (7.41) を右辺の各項ごとに適用することができる.したがって,交換ゲートの出力は,

$$
\begin{aligned}
&ac|0,0\rangle + ad|0,1\rangle + bc|1,0\rangle + bd|1,1\rangle \\
&\quad \longmapsto ac|0,0\rangle + ad|1,0\rangle + bc|0,1\rangle + bd|1,1\rangle \\
&\quad = (c|0\rangle + d|1\rangle)(a|0\rangle + b|1\rangle) \\
&\quad = |\phi\rangle|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

となり,確かに状態が交換されることがわかる. ∎

1 キュービットに作用するアダマールゲートと任意の位相 ϕ に対する位相ゲート,および,2 キュービットに作用する制御 NOT ゲートの組み合わせで,任意の n キュービットのユニタリー変換を実行することができる.これを**普遍性定理**[5)]という.

7.4 クローン禁止定理

空間的に離れた EPR ペアーの一方の状態を測定すると,他方の状態が一瞬で確定するという性質を使うと,光速度よりも速く情報の伝達ができるのではないかという疑問がわく.これは,量子論と相対論との整合性を考えさせられる興味深い問題である.

未知の状態 $|\psi\rangle$ にある量子が 1 個与えられたとしよう.$|\psi\rangle$ を知ろうとしてその位置 x を測定すると,その直後の運動量は全く不確定になってしまい測定前の量子状態は破壊される.運動量 p を測定しても同様である.したがって,量子が 1 個だけ与えられてもその量子状態を知ることは不可能である.ところが,もしこの状態を複製 (クローン) することができればどうだろうか.これが可能ならば,同一の状態 $|\psi\rangle$ で記述される系を多数複製し,そのおのおのに対して位置の測定をすることにより $|\psi\rangle$ を知ることができる.

5) A. Barenco, C. Bennett, R. Cleve, D. DiVincenzo, N. Margolus, P. Shor, T. Sleator, J. Smolin, and H. Weinfurter, Phys. Rev. A **52**, 3457 (1995).

未知の状態を複製できれば光速よりも速い通信が可能となる．いま，スピン一重項状態にある EPR ペアーを規則的に発生し，その一方をアリスへ，他方をボブへ送る状況を考えよう[6]．アリスは，飛んで来る粒子のスピンを z 軸に沿って測定するか，全く測定しないという 2 通りの状況を想定し，測定する場合が 2 進法の 1，測定しない場合が 0 を意味することにするとボブとあらかじめ約束しておく．ボブのところに飛んで行く粒子のスピンは，アリスが測定すれば z 成分の固有状態になっており，測定しなければ固有状態にはなっていない．ボブのところに飛んで来た，たった 1 個の粒子の量子状態を知ることは上に述べたようにできない．しかし，もし未知の量子状態を複製することができれば，ボブは飛んで来た粒子の量子状態を複製して，それらを z 軸に沿って多数回測定することにより，z 成分の固有状態になっているかいないかを知ることができる (固有状態であれば，測定結果はすべて同じであり，固有状態になっていなければ上向きと下向きがランダムに現れる)．こうして，ボブはアリスが測定したか測定しなかったかを知ることができ，上記の約束に従ってアリスからボブへ 0, 1 の情報を光速よりも速く送ることができる．

実は，未知の量子状態を複製することを禁止する**クローン禁止定理**が存在する[7] (既知の量子状態を複製することは前節の (7.37) からわかるように可能である)．

この定理を背理法で証明しよう．未知の量子状態を複製することが可能ならば，与えられた 2 つの異なった状態 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ に対して，

$$\hat{C}|\psi_1\rangle|\phi_{\rm i}\rangle = |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle, \qquad \hat{C}|\psi_2\rangle|\phi_{\rm i}\rangle = |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \tag{7.44}$$

を満足する演算子 $\hat{C}$ が存在する．ここで，$|\phi_{\rm i}\rangle$ は複製がつくられる系の始状態である．量子力学の線形性より複素数 a, b に対して，

$$\hat{C}(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle)|\phi_{\rm i}\rangle = a|\psi_1\rangle|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle|\psi_2\rangle \tag{7.45}$$

が成立する．しかし，$\hat{C}$ は重ね合わせの状態 $a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle$ も複製するので，

$$\hat{C}(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle)|\phi_{\rm i}\rangle = (a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle)(a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle) \tag{7.46}$$

---

6) 量子情報の分野では，情報の送り手をアリス (Alice)，受け手をボブ (Bob)，盗聴者をイブ (Eve) とよぶ．

7) W. K. Wooters and W. H. Zurek, Nature (London) **299**, 802 (1982); D. Dieks, Phys. Lett. A **92**, 271 (1982); H. P. Yuen, Phys. Lett. A **113**, 405 (1986); G. M. D'Ariano and H. P. Yuen, Phys. Rev. Lett. **76**, 2832 (1996).

となり (7.45) と矛盾する．したがって，未知の量子状態を複製することはできない．

クローン禁止定理は，量子力学の時間発展がユニタリーであることとも深い関係がある．いま，異なってはいるが直交はしない 2 つの状態 $|\psi_1\rangle$, $|\psi_2\rangle$ を考えよう ($|\langle\psi_1|\psi_2\rangle| \neq 1$, $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \neq 0$)．複製マシン $\hat{C}$ も量子力学に従って時間発展するので，$\hat{C}$ はユニタリー演算子である．議論をより一般的にするために，複製操作の前後における系を取り巻く環境の状態変化 $|\mathrm{E}\rangle \to |\mathrm{E}'\rangle$ も考慮すると，一般に複製操作は，

$$\left.\begin{aligned} \hat{C}|\psi_1\rangle|\phi_\mathrm{i}\rangle|\mathrm{E}\rangle &= |\psi_1\rangle|\psi_1\rangle|\mathrm{E}'\rangle, \\ \hat{C}|\psi_2\rangle|\phi_\mathrm{i}\rangle|\mathrm{E}\rangle &= |\psi_2\rangle|\psi_2\rangle|\mathrm{E}''\rangle \end{aligned}\right\} \tag{7.47}$$

と書ける．これらの式の内積をとり，$\hat{C}$ のユニタリー性 ($\hat{C}^\dagger\hat{C} = \hat{I}$) を使うと，

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = (\langle\psi_1|\psi_2\rangle)^2\langle\mathrm{E}'|\mathrm{E}''\rangle \tag{7.48}$$

が得られるが，これが満足されるためには $|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|$ の値が 0 または 1 である必要があるが，これは最初に述べた仮定と矛盾する．したがって，系のとりうる状態があらかじめ $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ の 2 つしかないとわかっている場合でも，これらが非直交であれば複製できない．

このように，未知の量子状態を複製することは，重ね合わせの原理や時間発展のユニタリー性という量子論の根本原理と矛盾する．非局所相関は非相対論的な量子論の枠内でも現れる概念なので，それが相対論と無矛盾かどうかは自明ではない．無矛盾性を保証するクローン禁止原理が，重ね合わせの原理や時間発展のユニタリー性という量子論の基本的な性質を使って証明されることは，物理学のさまざまな原理 (光速度不変の原理，重ね合わせの原理，ユニタリー時間発展など) の内的関連を示唆しているように思え興味深い．

7.5 非直交な状態の判別

2 つの状態 $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ が与えられたとして，これらを識別する方法を考えよう．$|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ とが直交する場合は，これらに対応する POVM 測定 (2.4 節参照)

$$\hat{N}_1 = |\psi_1\rangle\langle\psi_1|, \quad \hat{N}_2 = |\psi_2\rangle\langle\psi_2|, \quad \hat{N}_3 = \hat{I} - \hat{M}_1 - \hat{M}_2 \tag{7.49}$$

を行えばよい．測定演算子は $\{\hat{N}_m\}$ $(m = 1, 2, 3)$ の 3 個あるが，$|\psi_m\rangle$ $(m = 1, 2)$ に対しては必ず測定値 m が得られ，測定値 $m = 3$ が得られることは決してない．こうして，互いに直交する状態は確実に識別することができる．しかし，$|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ が直交しない (すなわち $\langle\psi_1|\psi_2\rangle \neq 0$) 場合は，上記の測定演算子では 2 つの状態を確実に識別することはできない．それは，どちらの状態に対しても測定値 $m = 1$ が得られる確率が 0 にならないからである．

互いに直交しない状態を効率よく区別するために，次のような条件を満たす POVM 測定 $\{\hat{M}_m\}$ $(m = 1, 2, 3)$ を考えよう．

$$\hat{M}_1|\psi_1\rangle = 0, \quad \hat{M}_2|\psi_2\rangle = 0, \quad \hat{M}_3 = \hat{I} - \hat{M}_1 - \hat{M}_2. \tag{7.50}$$

このとき，$|\psi\rangle = |\psi_1\rangle$ または $|\psi_2\rangle$ のいずれかであることがわかっていれば，測定値 $m = 1$ が得られれば，$|\psi\rangle$ が $|\psi_2\rangle$ であることがわかる．同様に，測定値 $m = 2$ が得られれば，$|\psi\rangle$ が $|\psi_1\rangle$ であることがわかる．他方，測定値 $m = 3$ が得られた場合は，状態 $|\psi\rangle$ についてはいかなる推定もできない．

条件 (7.50) を満足する $\hat{M}_1$ を

$$\hat{M}_1 = (a|\psi_1\rangle + b|\psi_2\rangle)(a^*\langle\psi_1| + b^*\langle\psi_2|)$$

の形で求めてみよう．条件 $\hat{M}_1|\psi_1\rangle = 0$ から

$$a^* + b^*\langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0 \longrightarrow a = -b\langle\psi_2|\psi_1\rangle^*.$$

よって，

$$\hat{M}_1 = p(\langle\psi_2|\psi_1\rangle^*|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle)(\langle\psi_2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| - \langle\psi_2|) \tag{7.51}$$

が得られる $(p \equiv |b^2| > 0)$．同様にして，

$$\hat{M}_2 = q(|\psi_1\rangle - \langle\psi_1|\psi_2\rangle^*|\psi_2\rangle)(\langle\psi_1| - \langle\psi_1|\psi_2\rangle\langle\psi_2|) \tag{7.52}$$

が得られる $(q > 0)$．

一般に，複数の量子状態を識別することは，量子情報処理をするうえで実際上要求される問題である．たとえ，始状態として，直交する状態の情報をエンコードしたとしても，ロスや雑音の混入によって状態は一般に非直交となる．上記の議論から，このような場合も，適切な測定を行うことによって測定結果から 2 つの状態を区別することができる．ただし，状態についていかなる推定

もできない場合が生じ(上記の例では測定値 $m=3$ が出た場合), これがエラーの原因となる.

問題 7.2 2次元のヒルベルト空間 $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ で2つの状態

$$|\psi_1\rangle = \cos\theta|0\rangle + \sin\theta|1\rangle, \qquad |\psi_2\rangle = \cos\chi|0\rangle + \sin\chi|1\rangle$$

が与えられたとする. この2つの状態を識別するPOVM測定を構成し, エラーが生じる確率が最小になるためにはどうすればよいかを考察せよ.

【ヒント】 (7.50)–(7.52) と同様の考察により, POVM測定は $a \equiv \cos(\theta-\chi)$ として,

$$\begin{aligned}
\hat{M}_1 &= p(a|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle)(a\langle\psi_1| - \langle\psi_2|), \\
\hat{M}_2 &= q(|\psi_1\rangle - a|\psi_2\rangle)(\langle\psi_1| - a\langle\psi_2|), \\
\hat{M}_3 &= \hat{I} - \hat{M}_1 - \hat{M}_2 \\
&= (1-a^2p-q)|\psi_1\rangle\langle\psi_1| + (1-p-a^2q)|\psi_2\rangle\langle\psi_2| \\
&\quad + a(p+q)(|\psi_1\rangle\langle\psi_2| + |\psi_2\rangle\langle\psi_1|)
\end{aligned}$$

で与えられる. よって, 問題はエラーの確率 P_{E}

$$P_{\mathrm{E}} = \left\|\hat{M}_3|\psi_1\rangle\right\|^2 + \left\|\hat{M}_3|\psi_2\rangle\right\|^2$$

を最小化することに帰着する. ■

7.6 ベルの不等式

空間的に離れた原子 A と B を考えよう. 同時刻では, 原子 A と B は相対論的な意味でスペースライクな関係にあるので[8), 一方の原子になされる測定行為は他方の原子に影響を与えないと(一見すると)思われる. これを, **アインシュタインの局所原理**という. しかし, 7.2節で述べたように, 原子 A と B がもつれた状態にあると, 両者がたとえ空間的にどんなに離れていても, 一方に対する測定は他方に影響を与える. 量子力学が内包するこの「幽霊のような遠隔作用」(アインシュタイン)は, 多くの研究者を悩まし続けてきた. それを避

8) 時空の2点 $(\boldsymbol{r}_1, t_1)$ と $(\boldsymbol{r}_2, t_2)$ が $s^2 \equiv (\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)^2 - c^2(t_1-t_2)^2 > 0$ (c は光速) なる関係にあるとき, これらの2点は**スペースライク**, $s^2 < 0$ のとき**タイムライク**という. 特に, 同時刻の場合は, 空間的に離れた2点は常にスペースライクな関係にある. 物理的な事象は光速よりも速く伝播できないので, スペースライクな時空点の間で信号のやり取りを行うことはできない.

けるための試みとして，いわゆる局所的な**隠れた変数理論**が考え出された (7.2 節参照)．ところが，ベルはこの理論が満足しなければならない不等式 —**ベルの不等式**— が存在し，それが量子論の予言と矛盾することを見出した[9]．

いま y 軸上に離れて存在するスピン 1/2 の原子 A と B を考え，それぞれの原子のスピンを 2 つの異なる方向で測定し，スピンが測定軸の正の方向を向いていれば +1，負の方向を向いていれば −1 なる測定値を与えるものと約束する．そして，原子 A に対する任意の 2 つの方向の測定値を Q, R，原子 B に対する任意の 2 つの方向の測定値を S, T とする．EPR ペアーごとに，原子 A に対して Q または R，原子 B 対して S または T の測定値が得られるので，いろいろな測定軸に対して行った多数の EPR ペアーの測定から相関関数 QS や RS などの期待値を求めることができる．

局所理論によれば，観測値 Q, R, S, T の確率分布は，EPR ペアーが生成される局所的な相互作用とその際に紛れ込むランダムな要素 —隠れた変数— によって決まり，その後の観測行為の影響は受けない．確率分布が局所的な事象によって決まり，しかもそれが，観測行為とは独立に存在するという仮定を**局所実在論**という．このとき，観測値 Q, R, S, T の確率分布 $P(Q, R; S, T)$ が存在する．ベルの不等式では，$QS + RS + RT - QT$ という形の相関関数に着目する．この相関関数の期待値は確率分布を用いて，

$$\langle QS + RS + RT - QT \rangle = \sum_{Q,R,S,T=\pm 1} P(Q, R; S, T)(QS + RS + RT - QT)$$

と書ける．ここで，Q, R, S, T のとりうるあらゆる組み合わせについて，$QS + RS + RT - QT$ は，2 または −2 の値しかとらない．実際，

$$QS + RS + RT - QT = Q(S - T) + R(S + T)$$

と書くと，$S - T$ と $S + T$ の一方は必ず 0 で，他方は 2 または −2 の値をとることがわかる．したがって，

$$QS + RS + RT - QT = \pm 2. \tag{7.53}$$

9) J. S. Bell, Physics **1**, 195 (1964); *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, 1987); J. F. Clauser, M. A. Horne, A. Shimony, and R. A. Holt, Phys. Rev. Lett. **49**, 1804 (1969).

観測値 Q, R, S, T の確率分布 $P(Q, R; S, T)$ は，確率変数が異なった値をとる事象が互いに独立な背反事象であると仮定すると，

$$\sum_{Q,R,S,T=\pm 1} P(Q, R; S, T) = 1 \tag{7.54}$$

を満足しなければならない．したがって，不等式

$$-2 \leq \langle QS + RS + RT - QT \rangle \leq 2 \tag{7.55}$$

が成立し，相関関数の絶対値の上限が 2 で与えられることがわかる．これを**ベルの不等式**という．

次に，(7.55) に現れる相関関数を量子力学で計算してみよう．原子 A のスピンの測定軸方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{q}, \boldsymbol{r}$，原子 B の測定軸方向の単位ベクトルを $\boldsymbol{s}, \boldsymbol{t}$ とする．対応するスピンの演算子は，パウリ行列を成分とするベクトル $\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$ を用いて，

$$\hat{Q} = \boldsymbol{q} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{A}}, \quad \hat{R} = \boldsymbol{r} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{A}}, \quad \hat{S} = \boldsymbol{s} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{B}}, \quad \hat{T} = \boldsymbol{t} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{B}} \tag{7.56}$$

で与えられる．ここで，上付きの添字 A, B は，それぞれ原子 A, B に対するスピン演算子であることを示している．このとき，次の関係式が成立する．

$$\begin{aligned}&(\hat{Q} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{T} - \hat{Q} \otimes \hat{T})^2 \\ &\quad = 4\hat{I}^{\mathrm{A}} \otimes \hat{I}^{\mathrm{B}} - 4[(\boldsymbol{q} \times \boldsymbol{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{A}}][(\boldsymbol{s} \times \boldsymbol{t}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{B}}].\end{aligned} \tag{7.57}$$

ここで，$\hat{I}^{\mathrm{A}}, \hat{I}^{\mathrm{B}}$ は，それぞれ原子 A, B のスピンに作用する恒等演算子 (2 行 2 列の単位行列) である．

問題 7.3 恒等式 (7.57) を証明せよ．

【解答】 (7.57) の左辺を成分ごとに書き下すと，

$$\sum_{i,j,k,l} [q_i(s_j - t_j) + r_i(s_j + t_j)][q_k(s_l - t_l) + r_k(s_l + t_l)](\hat{\sigma}_i^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_k^{\mathrm{A}})(\hat{\sigma}_j^{\mathrm{B}} \hat{\sigma}_l^{\mathrm{B}}). \tag{7.58}$$

ここで，パウリ行列の性質

$$\hat{\sigma}_j \hat{\sigma}_k = \delta_{j,k} \hat{I} + i\epsilon_{jkl} \hat{\sigma}_l \tag{7.59}$$

を用いると (ϵ_{jkl} は，j, k, l が 1, 2, 3 およびその偶置換の場合は +1，奇置換の場合は −1，それ以外は 0 をとるエディントン記号である．付録 (A.29) を参照)，

$$(\hat{\sigma}_i^{\mathrm{A}}\hat{\sigma}_k^{\mathrm{A}})(\hat{\sigma}_j^{\mathrm{B}}\hat{\sigma}_l^{\mathrm{B}}) = \delta_{i,k}\delta_{j,l}\hat{I}^{\mathrm{A}}\otimes\hat{I}^{\mathrm{B}} + i\delta_{i,k}\epsilon_{jln}\hat{I}^{\mathrm{A}}\otimes\hat{\sigma}_n^{\mathrm{B}} + i\delta_{j,l}\epsilon_{ikm}\hat{\sigma}_m^{\mathrm{A}}\otimes\hat{I}_m^{\mathrm{B}} - \epsilon_{ikm}\hat{\sigma}_m^{\mathrm{A}}\epsilon_{jln}\hat{\sigma}_n^{\mathrm{B}} \tag{7.60}$$

を得る．これを (7.58) に代入して計算すると，(7.60) の右辺の第 1 項に対応する項は 4 $\hat{I}^{\mathrm{A}}\otimes\hat{I}^{\mathrm{B}}$ を与え，第 2 項，第 3 項は 0 となる．第 4 項を計算すると，

$$-\sum_{i,j,k,l} 4\epsilon_{ikm}q_i r_k\hat{\sigma}_m^{\mathrm{A}}\epsilon_{jln}s_j t_l\hat{\sigma}_n^{\mathrm{B}} = -4\big[(\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{r})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{A}}\big]\big[(\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{t})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{B}}\big]$$

が得られる． ∎

さて，任意の演算子 $\hat{A}$ に対して，$\langle(\hat{A}-\langle\hat{A}\rangle)^2\rangle = \langle\hat{A}^2\rangle - \langle\hat{A}\rangle^2 \geq 0$ が成り立つので，

$$|\langle\hat{Q}\otimes\hat{S}+\hat{R}\otimes\hat{S}+\hat{R}\otimes\hat{T}-\hat{Q}\otimes\hat{T}\rangle| \leq 2\sqrt{\langle\hat{I}^{\mathrm{A}}\otimes\hat{I}^{\mathrm{B}} - \big[(\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{r})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{A}}\big]\big[(\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{t})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{B}}\big]\rangle}. \tag{7.61}$$

ここで，任意の状態に対して，

$$\langle\hat{I}^{\mathrm{A}}\otimes\hat{I}^{\mathrm{B}}\rangle = 1.$$

また，パウリ行列の期待値は 1 以下であるから，

$$-1 \leq \big\langle\big[(\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{r})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{A}}\big]\big[(\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{t})\cdot\hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\mathrm{B}}\big]\big\rangle \leq 1. \tag{7.62}$$

これを (7.61) に代入すると，

$$|\langle\hat{Q}\otimes\hat{S}+\hat{R}\otimes\hat{S}+\hat{R}\otimes\hat{T}-\hat{Q}\otimes\hat{T}\rangle| \leq 2\sqrt{2} \tag{7.63}$$

が得られる．これをベルの不等式 (7.55) と比較すると，相関関数の絶対値の上限値が 2 から $2\sqrt{2}$ へと大きくなっていることがわかる．したがって，実験結果が 2 よりも大きくなりベルの不等式が破れていれば，局所的な隠れた変数理論が否定されることになる．実際，実験結果はベルの不等式が破れていることを示しており[10)]，量子力学が予言する非局所相関が実証された．

ベルの不等式の破れが最大になるのは，(7.62) の不等式の下限値 (−1) が実現される場合である．これは，$\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{r}$ および $\boldsymbol{s}$ と $\boldsymbol{t}$ が，それぞれ互いに直交している場合である (次の問題を参照)．

---

10) A. Aspect, P. Grangier, and G. Roger, Phys. Rev. Lett. **47**, 460 (1981); **49**, 91 (1982).

問題 7.4 EPR ペアー (7.21) と

$$\hat{Q} = \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}}, \quad \hat{R} = \hat{\sigma}_x^{\mathrm{A}}, \quad \hat{S} = -\frac{\hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} + \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}}}{\sqrt{2}}, \quad \hat{T} = -\frac{\hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} - \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}}}{\sqrt{2}} \tag{7.64}$$

に対して，ベルの不等式が最大限に破れる，すなわち

$$\langle \hat{Q} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{S} + \hat{R} \otimes \hat{T} - \hat{Q} \otimes \hat{T} \rangle = 2\sqrt{2} \tag{7.65}$$

となることを示せ.

【解答】 (7.21) が (7.24) と書き換えられること，および状態 $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$ が $\hat{\sigma}_z$ の固有値 ± 1 の固有状態であり，また，状態 $|\pm\rangle$ が $\hat{\sigma}_x$ の固有値 ± 1 の固有状態であることを使って証明する．まず，

$$\langle \hat{Q}\hat{S} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} \langle \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} + \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}} \rangle.$$

ここで，右辺の第 2 項に対しては (7.21) に対する期待値をとる．$\hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}} |\Psi\rangle = -|\Psi\rangle$ を使うと，

$$\langle \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_z^{\mathrm{B}} \rangle = -1$$

が得られる．右辺の第 1 項に対しては (7.24) を使うと，

$$\begin{aligned}
\hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-\rangle_{\mathrm{A}} |+\rangle_{\mathrm{B}} + |+\rangle_{\mathrm{A}} |-\rangle_{\mathrm{B}}) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_{\mathrm{A}} |\uparrow\rangle_{\mathrm{B}} - |\downarrow\rangle_{\mathrm{B}} |\downarrow\rangle_{\mathrm{B}})
\end{aligned}$$

となるので，

$$\hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} |\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_{\mathrm{A}} |\uparrow\rangle_{\mathrm{B}} + |\downarrow\rangle_{\mathrm{B}} |\downarrow\rangle_{\mathrm{B}})$$

が得られる．この状態は $|\Psi\rangle$ と直交するので，$\langle \hat{\sigma}_z^{\mathrm{A}} \hat{\sigma}_x^{\mathrm{B}} \rangle = 0$. よって，

$$\langle \hat{Q}\hat{S} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}.$$

他の相関関数も同様に計算でき，

$$\langle \hat{R}\hat{S} \rangle = \langle \hat{R}\hat{T} \rangle = -\langle \hat{Q}\hat{T} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

が得られる．これらを (7.65) の左辺に代入すれば右辺が得られる． ∎

非局所相関はスペースライクな関係にある 2 点間にも存在し，一方の点での測定結果が他方の点のそれに影響を与える．しかし，これは相対性理論とは矛盾しない．相対性理論が要請していることは，信号が伝播する速さが光速を超えないということであり，スペースライクな時空点の状態の間に量子相関が存在することを否定してはいない．上記の原子の例でいうと，EPR ペアーの一

方の原子 A のスピンの状態をある軸に沿って測定すると，その瞬間に他方の原子 B のスピンはその軸方向の固有状態になるが，B の測定者は A の測定者から測定軸に関する情報を伝達されないかぎり，これを確かめることはできない．情報の伝達は光速度以下でしかできず，その情報を得ないかぎり，B の測定者にとって測定結果は全くランダムになる．これを示すために，EPR ペアー (7.21) に対する密度演算子

$$\begin{aligned}\hat{\rho} &= |\Phi\rangle\langle\Phi| \\ &= \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle_{\mathrm{A}}|\downarrow\rangle_{\mathrm{B}} - |\downarrow\rangle_{\mathrm{A}}|\uparrow\rangle_{\mathrm{B}})({}_{\mathrm{A}}\langle\uparrow|_{\mathrm{B}}\langle\downarrow| - {}_{\mathrm{A}}\langle\downarrow|_{\mathrm{B}}\langle\uparrow|)\end{aligned} \tag{7.66}$$

を考えよう．A の測定に関する情報を知らない B の観測者の還元密度演算子 $\hat{\rho}^{\mathrm{B}}$ は，(7.66) を A についてトレースをとることにより得られる．

$$\hat{\rho}^{\mathrm{B}} = \mathrm{Tr}_{\mathrm{A}}\hat{\rho} = \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle_{\mathrm{BB}}\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle_{\mathrm{BB}}\langle\downarrow|) = \frac{1}{2}\hat{I}^{\mathrm{B}}. \tag{7.67}$$

これは B の観測者にとって，スピンの測定結果が全くランダムであることを示している．

そもそも EPR の原論文[1] で展開された論理は，彼らが**実在の要素**とよんだ概念に基づいている．これは，「系に摂動を加えることなく，ある物理量の値を確実に予言することができれば，この物理量に対応する実在の要素が存在する」という存在哲学である．ニュートン力学は，自然が実在の要素から構成されていることが自明の前提となっている．これに対して量子力学では，観測行為によって系に摂動を与えないかぎり系の情報は一切取り出せないので，実在の要素は存在しない．EPR ペアーの場合，一方の状態を測定すると他方の状態も決まってしまう．ところが，このとき後者には直接的な作用は働いていないので，アインシュタインの局所原理が正しければ，他方の粒子は実在の要素をもっていることになる．しかし，ベルの不等式の破れの実験は[10]，これを否定し，「幽霊のような遠隔作用」が存在することを実証したのである．

7.7 グリーンバーガー–ホーン–ツァイリンガー (GHZ) 状態

ベルの不等式の破れを実証するためには，(7.63) に現れる量子力学的期待値を計算するために，多数の測定をくり返さなければならない．ところが，3 個のスピンが最大限もつれた状態

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2|\uparrow\rangle_3 - |\downarrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2|\downarrow\rangle_3\right) \tag{7.68}$$

では，たった 1 回の測定によって実在の要素を確実に否定することができる．これをみるために，互いに交換する 3 個のエルミート演算子

$$\hat{A} = \hat{\sigma}_x^1\hat{\sigma}_y^2\hat{\sigma}_y^3,$$
$$\hat{B} = \hat{\sigma}_y^1\hat{\sigma}_x^2\hat{\sigma}_y^3,$$
$$\hat{C} = \hat{\sigma}_y^1\hat{\sigma}_y^2\hat{\sigma}_x^3$$

を考えよう．ここで，$\hat{\sigma}_x^i$ は i 番目のスピンの x 軸方向のパウリスピン演算子 ((7.1) 参照) である．$|\psi\rangle$ は $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ の同時固有状態であり，固有値はすべて 1 であることが (7.68) を使って直接確かめられる．

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\psi\rangle, \quad \hat{B}|\psi\rangle = |\psi\rangle, \quad \hat{C}|\psi\rangle = |\psi\rangle. \tag{7.69}$$

さて，実在の要素が存在すると仮定すると，物理量 $\hat{\sigma}_x^i, \hat{\sigma}_y^i, \hat{\sigma}_z^i$ は空間的に十分に離れると，ある値 m_x^i, m_y^i, m_z^i をもち，(7.69) に対応して，

$$\left.\begin{aligned} m_x^1 m_y^2 m_y^3 &= 1, \\ m_y^1 m_x^2 m_y^3 &= 1, \\ m_y^1 m_y^2 m_x^3 &= 1 \end{aligned}\right\} \tag{7.70}$$

が成立する．例えば，1 番目と 2 番目のスピンをそれぞれ x 軸，y 軸方向に測り，$m_x^1 = 1$, $m_y^2 = 1$ が得られたとしよう．このとき，3 番目のスピンの値は，(7.70) の最初の式から，「系に摂動を加えることなく」確実に $m_y^3 = 1$ であることがわかる．さらに，(7.70) から

$$m_x^1 m_x^2 m_x^3 = 1 \tag{7.71}$$

が成立することがわかる．これに対応するエルミート演算子は，

$$\hat{D} = \hat{\sigma}_x^1\hat{\sigma}_x^2\hat{\sigma}_x^3$$

である．ところが，恒等式

$$\hat{D} = -\hat{A}\hat{B}\hat{C} \tag{7.72}$$

が成立するので $\hat{D}|\psi\rangle = -|\psi\rangle$ が導かれ，(7.71) と矛盾する．こうして，状態 (7.68) に対して物理量 $\hat{D}$ を測定すると，実在の要素が存在すると測定値は必ず

1 となるが，量子論の予言は常に -1 である．このような違いが現れた理由はc-数が互いに交換するのに対して，パウリスピン演算子は反交換するからである．状態 (7.68) は，このことを最初に指摘した人々の名前の頭文字をとって，**GHZ 状態**とよばれる[11)]．

7.8 量子テレポーテーション

EPR 相関は光速度を超えた通信に利用することはできないが，これを使えば未知の量子状態に関する情報をある場所から別な場所に伝えることができる．これが次に述べる**量子テレポーテーション**である．量子テレポーテーションとは，アリスから離れた場所にいるボブに未知の量子状態

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \tag{7.73}$$

を EPR ペアーと古典的な通信手段を使って送ることをいう[12)]．EPR ペアーは，(7.39) で示したように，重ね合わせの状態を制御 NOT ゲートに入力することによってつくられるが，ここではこれを一般化した図 7.7 のような量子回路を考えよう．

まず，入力された状態 $|x\rangle|y\rangle$ は，アダマールゲートにより重ね合わせの状態

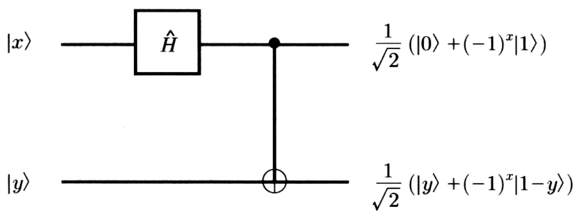


図 7.7 ベル状態の生成

11) D. M. Greenberger, M. Horne and A. Zeilinger, in *Bell's Theorem, Quantum Theory, and Conceptions of the Universe*, M. Kafatos, ed. (Kluwer, 1989) p.69; D. M. Greenberger, M. A. Horne, A. Shimony, and A. Zeilinger, Am. J. Phys. **58**, 1131 (1990).

12) C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, and W. Wooters, Phys. Rev. Lett. **70**, 1895 (1993).

に変換される.

$$|x\rangle|y\rangle \longmapsto \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + (-1)^x|1\rangle)|y\rangle. \tag{7.74}$$

この状態を制御 NOT ゲートに入力すると，出力状態は次のようになる.

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + (-1)^x|1\rangle)|y\rangle\\ &\qquad\longmapsto \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,y\rangle + (-1)^x|1,1-y\rangle) \equiv |B_{xy}\rangle.\end{aligned} \tag{7.75}$$

これを x, y の値ごとに書き下すと,

$$\left.\begin{aligned}|B_{00}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,0\rangle + |1,1\rangle),\\ |B_{01}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,1\rangle + |1,0\rangle),\\ |B_{10}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,0\rangle - |1,1\rangle),\\ |B_{11}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,1\rangle - |1,0\rangle).\end{aligned}\right\} \tag{7.76}$$

(7.21) のスピンシングレット対は $|B_{11}\rangle$ に対応している．(7.76) の状態はいずれも直積状態で書けないエンタングルした状態であり，EPR ペアーとよばれたり **ベル状態**とよばれたりする.

量子テレポーテーションは，これらのいずれの状態を用いても実現できるが，以下では状態 $|B_{00}\rangle$ を用いることにしよう．アリスとボブはそれぞれ EPR ペアーの片方ずつをもっており，さらに，アリスには未知の状態 $|\Psi\rangle$ が与えられているとする．このとき，始状態は,

$$|\Psi\rangle|B_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle)(|0,0\rangle + |1,1\rangle) \tag{7.77}$$

で与えられる．ここで，右辺の状態の最初の 2 キュービットがアリス，最後のキュービットはボブが所有している (例えば，$|0\rangle|0,0\rangle$ の最初と次の 0 がアリス，最後の 0 がボブのキュービットの状態である).

まず，アリスは 1 番目と 2 番目のキュービットの状態を，それぞれ制御 NOT ゲートの制御キュービットと標的キュービットに入力する．その結果，状態 (7.77) は次のように変換される.

$$|\Psi\rangle|B_{00}\rangle \longmapsto \frac{1}{\sqrt{2}}\big[\alpha|0\rangle(|0,0\rangle + |1,1\rangle) + \beta|1\rangle(|1,0\rangle + |0,1\rangle)\big]. \tag{7.78}$$

次に，アリスは1番目のキュービットをアダマールゲートに入力する．そうすると，出力後の全系の状態は，

$$
\begin{aligned}
|\Phi\rangle &= \frac{1}{2}[\alpha(|0\rangle + |1\rangle)(|0,0\rangle + |1,1\rangle) + \beta(|0\rangle - |1\rangle)(|1,0\rangle + |0,1\rangle)] \\
&= \frac{1}{2}[|0,0\rangle(\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle) + |0,1\rangle(\alpha|1\rangle + \beta|0\rangle) \\
&\quad + |1,0\rangle(\alpha|0\rangle - \beta|1\rangle) + |1,1\rangle(\alpha|1\rangle - \beta|0\rangle)]
\end{aligned} \tag{7.79}
$$

となる．この状態 $|\Phi\rangle$ に対して，アリスは所有する2つのキュービットの測定を行い，読み出された値を x, y としよう．その結果，アリスのキュービットとエンタングルしたボブのキュービットの状態も変化する (観測による波束の収縮)．読み出された値 x, y に対応したボブの量子状態を $|\gamma_{xy}\rangle$ と書くと，(7.79) から

$$
\left.
\begin{aligned}
|\gamma_{00}\rangle &= \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \\
|\gamma_{01}\rangle &= \alpha|1\rangle + \beta|0\rangle, \\
|\gamma_{10}\rangle &= \alpha|0\rangle - \beta|1\rangle, \\
|\gamma_{11}\rangle &= \alpha|1\rangle - \beta|0\rangle
\end{aligned}
\right\} \tag{7.80}
$$

が得られる．

アリスは，読み出された2ビットの測定値 00, 01, 10, 11 をボブに古典的な通信手段で伝える．それが00であれば，ボブのキュービットの状態がアリスがボブに伝えたい状態 (7.73) そのものとなっている ($|\gamma_{00}\rangle = |\Psi\rangle$)．他方，それが 01, 10, 11 であれば，それぞれに対応してボブは自分のキュービットに対して，次のようなユニタリー変換を施すことにより状態 $|\Phi\rangle$ を得ることができる．

$$
\hat{\sigma}_x|\gamma_{01}\rangle = |\Psi\rangle, \qquad \hat{\sigma}_z|\gamma_{10}\rangle = |\Psi\rangle, \qquad \hat{\sigma}_z\hat{\sigma}_x|\gamma_{11}\rangle = |\Psi\rangle. \tag{7.81}
$$

こうして，EPR ペアーと2ビットの古典情報の伝達により，アリスはボブへ未知の量子状態を伝えることができる．

7.9 超高密度符号化

量子テレポーテーションは，2 ビットの古典情報を送ることによって 1 キュービットの未知の情報をアリスからボブへ送る方法であったが，これとは逆に，2 ビットの古典情報を，1 キュービットを送ることによって，アリスからボブへと伝えることができる．これを**超高密度符号化**という．

まず，アリスとボブは EPR ペアー

$$|B_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0,0\rangle + |1,1\rangle) \tag{7.82}$$

の片方ずつをもっているとする (アリスは最初のキュービット，ボブは 2 番目のキュービットをもつとしよう)．アリスはボブへ 2 ビットの情報，すなわち，00, 01, 10, 11 のいずれかをボブへ送りたいとする．アリスとボブは，あらかじめこれらが (7.76) で定義されたベル状態 $|B_{00}\rangle, |B_{01}\rangle, |B_{10}\rangle, |B_{11}\rangle$ に対応していると約束しておく．

さて，アリスがボブに送りたい情報が 00 の場合は，アリスは自分のもっているキュービットをボブにそのまま送ればよい．そうすれば，ボブはアリスから受け取ったキュービットと自分のもっているキュービットを合わせた状態が (7.82) となっていることから，アリスが送りたい情報が 00 であることを知ることができる．

01 の場合は，アリスは自分のキュービットにユニタリー演算 $\hat{\sigma}_x$ を作用させたものをボブに送ればよい．このとき，ボブがもつ 2 キュービットの状態は，

$$\hat{\sigma}_x|B_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,0\rangle + |0,1\rangle) = |B_{01}\rangle \tag{7.83}$$

で与えられる．ここで，$\hat{\sigma}_x$ は最初のビットにのみ作用するものとする．こうして，ボブはアリスが送りたい情報が 01 であることを知ることができる．

同様にして，送りたい情報が 10 の場合は $\hat{\sigma}_z$ を，11 の場合は $i\hat{\sigma}_y$ を作用させたものをボブに送ればよいことがわかる．

このようにして，2 ビットの古典情報を量子論では 1 キュービットの情報を送ることにより，アリスからボブへ伝えることができる．これを超高密度符号化という．

7.10 量子アルゴリズム

7.2 節で述べたように，観測結果が確率的に揺らぐという量子論特有の性質のため，量子計算は常に有効とは限らない．そこで，干渉効果などを利用して，望みの計算結果が得られる確率をできるだけ高める工夫が必要となる．ここでは，量子計算が有効な例を紹介する．これら具体例を通じて，テンソル積，エンタングルメント，重ね合わせの原理，干渉効果という量子力学の性質が，計算の効率を上げるうえでいかに巧みに利用されているかという点を理解してほしい．

ドイチュのアルゴリズム

$\{0,1\}$ から $\{0,1\}$ への写像 f として次の 2 通りの場合を考える．

- 場合 1: $f(0)=f(1)=0$ または $f(0)=f(1)=1$.
- 場合 2: $f(0)=0,\ f(1)=1$ または $f(0)=1,\ f(1)=0$.

このいずれの場合であるかを知るためには，古典的には $f(0)$ と $f(1)$ の 2 回測定しなければならないが，量子論では 1 回の測定で知ることができる[13)]．

まず，図 7.8 のような**制御オラクル**とよばれる量子ゲートを考える．**オラクル** (日本語では「神託」) とは，与えられた関数 (いまの場合は $f(x)$) の値を，具体的な方法は問わずに計算してくれるブラックボックスをいう．制御オラクルは，制御キュービットの入力状態 $|x\rangle$ を受けて関数 $f(x)$ を計算し，それを標的キュービットの入力 $|y\rangle$ の引数 y に足して，状態 $|y+f(x) \bmod 2\rangle$ を出力するものである．$f(x)$ が上記のいずれの場合であっても，この操作はユニタリーであるので，オラクル f は量子力学的な時間発展として記述できる．

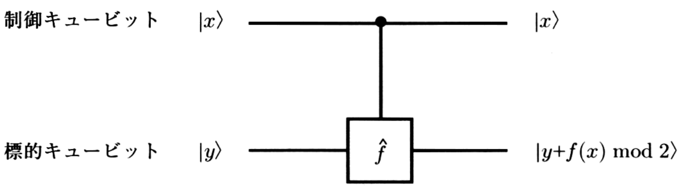


図 7.8 制御オラクル

13) D. Deutsch, Proc. R. Soc. London A **400**, 97 (1985). ここでは，クリーブらによる改良版を述べる．R. Cleve, A. Eckert, C. Macchiavello, and M. Mosca, Proc. R. Soc. London A **454**, 339 (1998).

標的キュービット入力としては，次のような重ね合わせの状態を考える．

$$|y\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{z=0,1} e^{-i\pi z}|z\rangle. \qquad (7.84)$$

この状態は，$|1\rangle$ をアダマールゲートに入力した出力として得られる．このとき，制御オラクルは全系の状態を次のように変換する．

$$\begin{aligned}|x\rangle|y\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{z=0,1} e^{-i\pi z}|x\rangle|z\rangle \\ &\longmapsto \frac{1}{\sqrt{2}}\sum_{z=0,1} e^{-i\pi z}|x\rangle|z+f(x) \bmod 2\rangle \\ &= \frac{e^{i\pi f(x)}}{\sqrt{2}}\sum_{z=0,1} e^{-i\pi(z+f(x))}|x\rangle|z+f(x) \bmod 2\rangle \\ &= \frac{e^{i\pi f(x)}}{\sqrt{2}}\sum_{z=0,1} e^{-i\pi z}|x\rangle|z\rangle \\ &= e^{i\pi f(x)}|x\rangle|y\rangle. \end{aligned} \qquad (7.85)$$

このように，制御オラクルは，全系の状態ベクトルに位相因子 $e^{i\pi f(x)} = (-1)^{f(x)}$ をつけ加える役割を果たす．

さらに，図 7.9 に示された演算を行う．

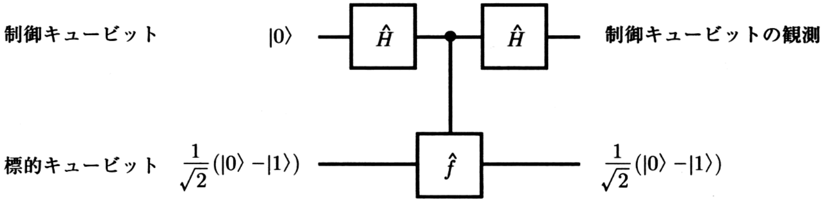


図 7.9 ドイチュのアルゴリズム

このとき，入力状態 $\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle(|0\rangle - |1\rangle)$ は $\hat{H}$, f, $\hat{H}$ の作用によって，次のように変換される．

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle(|0\rangle - |1\rangle) &\longmapsto \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle) \\ &\longmapsto \frac{1}{2}(-1)^{f(0)}|0\rangle(|0\rangle - |1\rangle) + \frac{1}{2}(-1)^{f(1)}|1\rangle(|0\rangle - |1\rangle) \\ &\longmapsto \frac{1}{2\sqrt{2}}(-1)^{f(0)}(|0\rangle + |1\rangle)(|0\rangle - |1\rangle)\end{aligned}$$

$$+\frac{1}{2\sqrt{2}}(-1)^{f(1)}(|0\rangle-|1\rangle)(|0\rangle-|1\rangle)$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{2}}\Big\{[(-1)^{f(0)}+(-1)^{f(1)}]|0\rangle$$

$$+[(-1)^{f(0)}-(-1)^{f(1)}]|1\rangle\Big\}(|0\rangle-|1\rangle). \quad (7.86)$$

これから，場合 1 のときは $(-1)^{f(0)}-(-1)^{f(1)}=0$ となるので，制御ビットの出力状態は確率 1 で $|0\rangle$，場合 2 のときは $(-1)^{f(0)}+(-1)^{f(1)}=0$ となるので，制御ビットの出力状態は確率 1 で $|1\rangle$ となる．したがって，制御キュービットの出力を観測して，状態 $|0\rangle$ が見出されれば場合 1，状態 $|1\rangle$ が見出されれば場合 2 であるといえる．このように，場合 1 か場合 2 かを判断するためには，古典的には 2 回観測が必要であるが，量子的には 1 回の観測で十分である．

問題 7.5 (**ドイチュ-ジョサのアルゴリズム**) ドイチュのアルゴリズムを一般化した次のような問題を考えよう．

アリスは 2^n 個の数 $x=0,1,\cdots,2^n-1$ から 1 つを選んでボブに送る．ボブは受け取った数 x に対して関数 $f(x)$ を計算し，その結果をアリスに送り返す．$f(x)$ の値は，

- 場合 1: すべての x に対して定数 (=0 または 1),
- 場合 2: 2^n 個のうち半分に対して 0，残りの半分に対して 1

のいずれかであるとしよう．このいずれの場合であるかをアリスが確実に判断するためには，アリスはボブにいくつの数を送る必要があるだろうか．古典的には，最悪の場合，アリスは最初の $2^n/2$ 個がすべて 0 を受け取り，その次に 1 を受け取ることによって，場合 2 であることが判明することもありうるので，どちらの場合かを確実に判定するためには，最低 $2^n/2+1$ 個の数を送る必要がある．ところが量子論では，これを 1 回の測定で判定できる．これを上記の議論を制御キュービットの数が，n 個の場合に拡張することによって示せ (図 7.10).

【解答】 制御キュービットの始状態がすべて $|0\rangle$ の場合を考える．最初のアダマールゲートを通過した制御キュービットの状態は (7.31) から，

$$\frac{1}{\sqrt{2^n}}\sum_{x=0}^{2^n-1}|x\rangle=\frac{1}{\sqrt{2^n}}\sum_{x_1,\cdots,x_n=0,1}|x_1,\cdots,x_n\rangle \quad (7.87)$$

で与えられる．ここで，左辺は 10 進数表示，右辺は 2 進数の計算基底で表示して

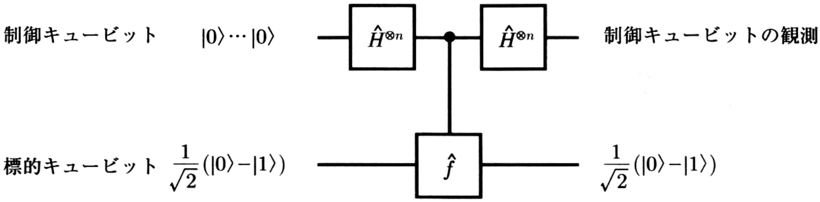


図 7.10 ドイチュ-ジョサのアルゴリズム．$\hat{H}^{\otimes n}$ は n キュービットのそれぞれにアダマールゲートを作用させることを意味する．

いる．(7.87) の各状態を，アリスのもっている数 $x = 0, 1, \cdots, 2^n - 1$ に対応させて考える．標的キュービットの始状態は，ドイチュのアルゴリズムの場合と同様に $\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$ ととれば，全系の始状態は，

$$\frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x_1, \cdots, x_n = 0,1} |x_1, \cdots, x_n\rangle(|0\rangle - |1\rangle). \tag{7.88}$$

これに制御オラクルを作用させると出力状態は，

$$\frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x_1, \cdots, x_n = 0,1} (-1)^{f(x)}|x_1, \cdots, x_n\rangle(|0\rangle - |1\rangle). \tag{7.89}$$

制御キュービットの出力をアダマールゲートに通過させる．アダマールゲートの作用は (7.29) で与えられるので出力は，

$$\frac{1}{2^n\sqrt{2}} \sum_{x_1, \cdots, x_n = 0,1} \sum_{z_1, \cdots, z_n = 0,1} (-1)^{x \cdot z + f(x)}|z_1, \cdots, z_n\rangle(|0\rangle - |1\rangle). \tag{7.90}$$

ここで，$x \cdot z = x_1 z_1 + \cdots + x_n z_n$ である．出力された制御キュービットの状態をアリスは観測する．状態 $|0, \cdots, 0\rangle$ に対する確率振幅は $\sum_x (-1)^{f(x)}/2^n$ なので，場合 1 のときはこれは ± 1 となる．また，場合 2 のときは 0 となる．これは，状態 $|0, \cdots, 0\rangle$ が観測される確率が場合 1 のときは 1，場合 2 のときは 0 であることを示している．したがって，1 回の測定で状態 $|0, \cdots, 0\rangle$ が観測されれば場合 1，それ以外は場合 2 であるといえる． ∎

グローバーの検索アルゴリズム

グローバーのアルゴリズムは，ファイル検索の量子アルゴリズムである[14]．N 個のファイルがあり，その中から目当ての 1 つのファイルを 50%の成功確率で探し出したいとしよう．古典的には最低 $N/2$ ステップ数が必要であるが，量子並列性と干渉効果をうまく使うと，$\sqrt{N}$ 程度のステップ数で正しいファイルが検出できる．

14) L. K. Grover, Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997).

いま，N 個の互いに直交する状態 $|1\rangle, |2\rangle, \cdots, |N\rangle$ から，ある状態 $|p\rangle$ $(1 \leq p \leq N)$ を検索したいとしよう．初めに，どの状態に対しても検索に有利な前提知識がないものとすると，始状態 $|\Psi\rangle$ はすべての状態を等しい重みで重ね合わせたものとなるから，

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} |n\rangle. \tag{7.91}$$

状態 $|p\rangle$ を検索するために，次の 2 つのユニタリー演算子を導入する．

$$\hat{U}_p = 1 - 2|p\rangle\langle p|, \qquad \hat{U}_\Psi = 2|\Psi\rangle\langle\Psi| - 1. \tag{7.92}$$

$\hat{U}_p$ は状態 $|p\rangle$ のみの符号を変える演算子，$\hat{U}_\Psi$ は始状態 $|\Psi\rangle$ を変えない演算子である．始状態を $|p\rangle$ とそれ以外の状態に分割する．

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}}|p\rangle + \sqrt{\frac{N-1}{N}}|\Psi'\rangle \\ &= \sin\theta|p\rangle + \cos\theta|\Psi'\rangle. \end{aligned} \tag{7.93}$$

ここで，$\sin\theta \equiv 1/\sqrt{N}$，$\cos\theta = \sqrt{(N-1)/N}$，また，

$$|\Psi'\rangle \equiv \sqrt{\frac{N}{N-1}}\left(|\Psi\rangle - \frac{1}{\sqrt{N}}|p\rangle\right) = \frac{1}{\cos\theta}(|\Psi\rangle - \sin\theta|p\rangle) \tag{7.94}$$

である．2 つの基底 $|p\rangle, |\Psi\rangle$ に対するユニタリー演算子 $\hat{U}_p, \hat{U}_\Psi$ の作用が，

$$\begin{aligned} &\hat{U}_p|p\rangle = -|p\rangle, & &\hat{U}_p|\Psi'\rangle = |\Psi'\rangle \\ &\hat{U}_\Psi|p\rangle = -\cos 2\theta|p\rangle + \sin 2\theta|\Psi'\rangle, & &\hat{U}_\Psi|\Psi'\rangle = \sin 2\theta|p\rangle + \cos 2\theta|\Psi'\rangle \end{aligned}$$

であることを使うと，

$$\begin{aligned} \hat{U}_p|\Psi\rangle &= -\sin\theta|p\rangle + \cos\theta|\Psi'\rangle, \\ (\hat{U}_p\hat{U}_\Psi)\hat{U}_p|\Psi\rangle &= -\sin 3\theta|p\rangle + \cos 3\theta|\Psi'\rangle. \end{aligned}$$

数学的帰納法により

$$(\hat{U}_p\hat{U}_\Psi)^k\hat{U}_p|\Psi\rangle = -\sin(2k+1)\theta|p\rangle + \cos(2k+1)\theta|\Psi'\rangle \tag{7.95}$$

が示される．したがって，与えられた $\theta = \sin^{-1}(1/\sqrt{N})$ に対して，$(2k+1)\theta = \pi/2$ に最も近い整数 k を選べば，1 に近い確率で所望の状態 $|p\rangle$ を取り出すことができる．$N \gg 1$ の場合は $\theta \simeq 1/\sqrt{N}$ なので，$k \simeq (\pi/4)\sqrt{N}$ であることが

わかる．すなわち，$\sqrt{N}$ 程度のステップ数で所望の状態が検索できる．これは最低 $N/2$ ステップが必要な古典的な場合に比べて $\sqrt{N}$ 倍の改善になっている．

7.11 量 子 暗 号

古典論では，系の状態を乱すことなく物理量を観測することができるので，痕跡を残さずに盗聴することが原理的には可能である．しかし，量子論では情報を読み出すと系の量子状態は必然的に変化してしまうので，この変化をプローブすることによって通信の途中で盗聴されたかどうかを知ることができる．こうして，盗聴することが原理的に不可能な通信方式が構築できる．これが**量子暗号**である．

いま，情報の送信者をアリス，受信者をボブ，盗聴者をイブとよぶことにしよう．アリスは光子の偏光状態に情報をエンコードしてボブに情報を送るという状況を考える．光の偏光は，**直線偏光**と**円偏光**の 2 種類考えられる．波数が $\boldsymbol{k}$ に決まった偏光状態を考えよう．このとき，第二量子化された電場演算子は，(3.64) から

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\lambda=1,2} i\alpha\boldsymbol{\varepsilon}_\lambda(\hat{a}_\lambda e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega t)} - \hat{a}_\lambda^\dagger e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega t)}) \tag{7.96}$$

と書ける．ここで，$\alpha \equiv \sqrt{\hbar\omega/2\epsilon_0 V}$ は 1 光子あたりの電場振幅，λ は偏光の自由度を表す量子数であり，生成消滅演算子などの下付きの添字の $\boldsymbol{k}$ は省略している．

直線偏光の場合は，波数ベクトルの方向を z 軸，$\boldsymbol{\varepsilon}_1, \boldsymbol{\varepsilon}_2$ をそれぞれ x 軸, y 軸の正の方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}_x, \boldsymbol{e}_y$ に等しくおくことによって，(7.96) は次のようになる．

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\lambda=x,y} i\alpha\boldsymbol{e}_\lambda(\hat{a}_\lambda e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega t)} - \hat{a}_\lambda^\dagger e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega t)}). \tag{7.97}$$

ここで，$\hat{a}_x, \hat{a}_y$ は，交換関係

$$[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger] = 1, \quad [\hat{a}_x, \hat{a}_y] = [\hat{a}_x, \hat{a}_y^\dagger] = 0 \tag{7.98}$$

を満足している．$\hat{a}_x$ は $\hat{a}_y$ や $\hat{a}_y^\dagger$ と交換するので，直交する直線偏光は同時に確定した値をとることができる．

右まわり円偏光，左まわり円偏光の偏光ベクトルを，それぞれ $\boldsymbol{e}_+, \boldsymbol{e}_-$ と書くと，これらは直線偏光ベクトルと

$$\boldsymbol{e}_+ = \frac{\boldsymbol{e}_x + i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}}, \qquad \boldsymbol{e}_- = \frac{\boldsymbol{e}_x - i\boldsymbol{e}_y}{\sqrt{2}} \tag{7.99}$$

という関係で結ばれている．これらを逆に解いた式

$$\boldsymbol{e}_x = \frac{\boldsymbol{e}_+ + \boldsymbol{e}_-}{\sqrt{2}}, \qquad \boldsymbol{e}_y = \frac{\boldsymbol{e}_+ - \boldsymbol{e}_-}{\sqrt{2}i} \tag{7.100}$$

を (7.97) に代入すると，

$$\hat{\boldsymbol{E}}(\boldsymbol{r},t) = i\alpha\left[(\boldsymbol{e}_+\hat{a}_+ + \boldsymbol{e}_-\hat{a}_-)e^{i(\boldsymbol{kr}-\omega t)} - (\boldsymbol{e}_+\hat{a}_-^\dagger + \boldsymbol{e}_-\hat{a}_+^\dagger)e^{-i(\boldsymbol{kr}-\omega t)}\right] \tag{7.101}$$

が得られる．ここで，

$$\hat{a}_+ \equiv \frac{\hat{a}_x - i\hat{a}_y}{\sqrt{2}}, \qquad \hat{a}_- \equiv \frac{\hat{a}_x + i\hat{a}_y}{\sqrt{2}} \tag{7.102}$$

は，それぞれ $\boldsymbol{e}_+, \boldsymbol{e}_-$ に対応する円偏光の消滅演算子であり，交換関係

$$[\hat{a}_+, \hat{a}_+^\dagger] = 1, \qquad [\hat{a}_-, \hat{a}_-^\dagger] = 1, \qquad [\hat{a}_+, \hat{a}_-] = [\hat{a}_+, \hat{a}_-^\dagger] = 0 \tag{7.103}$$

を満足している．$\hat{a}_+$ は $\hat{a}_-$ や $\hat{a}_-^\dagger$ と交換するので，右まわり円偏光と左まわり円偏光は同時に決まった値をとることができる．

しかし，直線偏光と円偏光の生成消滅演算子は一般には交換しない．

$$[\hat{a}_x, \hat{a}_+^\dagger] = [\hat{a}_x, \hat{a}_-^\dagger] = \frac{1}{\sqrt{2}} \neq 0, \tag{7.104}$$

$$[\hat{a}_y, \hat{a}_+^\dagger] = -[\hat{a}_y, \hat{a}_-^\dagger] = \frac{i}{\sqrt{2}} \neq 0. \tag{7.105}$$

これは，直線偏光と円偏光の間に不確定性関係が存在することを意味している．いま，直線偏光を測定してそれが x 軸方向を向いていることを確認したとすると，測定直後の光の状態は，

$$|X\rangle \equiv \hat{a}_x^\dagger|\mathrm{vac}\rangle. \tag{7.106}$$

ところが，$\hat{a}_x^\dagger = (\hat{a}_+^\dagger + \hat{a}_-^\dagger)/\sqrt{2}$ なので，(7.106) は次のように書き換えることができる．

$$|X\rangle = \frac{\hat{a}_+^\dagger + \hat{a}_-^\dagger}{\sqrt{2}}|\mathrm{vac}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle). \tag{7.107}$$

ここで，$|\pm\rangle \equiv \hat{a}_{\pm}^{\dagger}|\mathrm{vac}\rangle$ である．(7.107) から直線偏光の測定した直後の状態は，円偏光が右まわりか左まわりかが全く不確定になる．逆に，円偏光を測定すると，直線偏光が垂直か水平かが全く不確定になる．

アリスからボブへ情報を送る際，直線偏光の場合は，x 偏光の場合 1，y 偏光の場合 0，円偏光の場合は，右まわり偏光の場合は 1，左まわり偏光の場合は 0 などと約束して情報を送る．いま，アリスからボブへ x 偏光の光子を送ったとしよう．それをイブが盗聴しているとすると，イブはアリスが選んだ偏光方向はわからないので，直線偏光か円偏光をあてずっぽうで測定する．イブが直線偏光で盗聴した場合は，イブはアリスが送ってきた光子の状態を正しく測定し，しかも，光子は直線偏光板をそのまま通過するので，ボブにも正しい情報が送られる．この場合，盗聴は見破られない．このようにして盗聴が成功する確率は 1/2 である．イブが円偏光を選んだ場合は，盗聴直後の光子の状態は 1/2 の確率で $|+\rangle$ または $|-\rangle$ になるが，そのいずれの場合でも，ボブが直線偏光を測定してアリスが送った状態 $|X\rangle$ が観測される確率は $1/2 \times 1/2 = 1/4$ となる．この場合は，ボブはアリスが送った情報を正しく受け取っているので盗聴はやはり見破られない．しかし，イブが状態 $|Y\rangle$ を観測すると，ボブはアリスが送った偏光と異なる偏光を受け取るので盗聴は見破られる．結局，イブの盗聴が成功する確率は 1 光子につき $1/2 + 1/4 = 3/4$ ということになる．これから，アリスはボブに n 個のテスト光子を送ってボブが正しい情報を受け取ったかどうかを照合することによって，イブが盗聴しているかどうかを

$$P_n = 1 - \left(\frac{3}{4}\right)^n \tag{7.108}$$

の確率で見破ることができる．例えば，$n = 100$ とすると $P_{100} \simeq 1 - 10^{-12}$ となる．こうして，テスト光子の数 n を大きくすることで，イブの盗聴を見破る確率をいくらでも 1 に近づけることができる．

付　録

A.1 デルタ関数

デルタ関数 $\delta(x)$ は，次の 2 つの条件，すなわち，

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & (x \neq 0), \\ \infty & (x = 0) \end{cases} \tag{A.1}$$

かつ $x = 0$ で連続的な任意の関数 $f(x)$ に対して，

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\,dx = f(0) \tag{A.2}$$

を満足する関数として定義される．特に，(A.2) で $f(x) = 1$ とおくと，

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,dx = 1 \tag{A.3}$$

が得られる．

デルタ関数は，超関数の一種であり，普通の関数の極限として定義される．

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to+0} \frac{1}{\pi}\frac{\epsilon}{x^2+\epsilon^2}, \tag{A.4}$$

$$\delta(x) = \lim_{\epsilon\to+0} \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}}e^{-\frac{x^2}{2\epsilon}}, \tag{A.5}$$

$$\delta(x) = \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\sin\alpha x}{\pi x} = \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\sin^2\alpha x}{\pi\alpha x^2}, \tag{A.6}$$

$$\delta(x) = \lim_{\alpha\to\infty} \frac{\alpha}{2\cosh^2\alpha x}. \tag{A.7}$$

ここで，$\epsilon \to +0$ は正の側から 0 とする極限をとることを意味する．これらはいずれも，上記の条件 (A.1), (A.2), (A.3) を満足する．

デルタ関数は，次の性質を有する．

$$\delta(-x) = \delta(x), \tag{A.8}$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), \tag{A.9}$$

$$x\delta(x) = 0, \tag{A.10}$$

$$x\delta'(x) = -\delta(x), \tag{A.11}$$

$$\delta(f(x)) = \sum_{i=0}^{n} \frac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x - x_i), \tag{A.12}$$

$$\theta'(x) = \delta(x). \tag{A.13}$$

ここで，x_i は，$f(x)$ の根 (すなわち $f(x_i) = 0$．ただし重根を除く) であり，また，$\theta(x)$ は，$x > 0$ で 1，$x < 0$ で 0，$x = 0$ で 1/2 の値をとる**階段関数**である．

デルタ関数は，指数関数 e^{ikx} の積分として表すことができる．

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}\, dk. \tag{A.14}$$

これは，次のように示すことができる．まず，

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx}e^{-\frac{\epsilon k^2}{2}}\, dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi\epsilon}}e^{-\frac{x^2}{2\epsilon}}. \tag{A.15}$$

この式で極限 $\epsilon \to +0$ をとり，(A.5) を使うと (A.14) が導かれる．

デカルト座標系以外の座標系でのデルタ関数の取扱いは注意を要する．よく使う例として，極座標を考える．座標系をデカルト座標系 (x, y, z) から極座標系 (r, θ, ϕ) へ変換しても積分の値が不変であることを要請すると，

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} &\delta(x)\delta(y)\delta(z)\, dxdydz \\ &= \int_{0}^{2\pi} d\phi \int_{0}^{\pi} \sin\theta\, d\theta \int_{0}^{\infty} r^2\, dr\, \delta(\boldsymbol{r}).\end{aligned} \tag{A.16}$$

これから，極座標におけるデルタ関数が次のように書けることがわかる．

$$\begin{aligned}\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) &\equiv \delta(x_1 - x_2)\,\delta(y_1 - y_2)\,\delta(z_1 - z_2) \\ &= \frac{1}{r_1^2 \sin\theta_1}\,\delta(r_1 - r_2)\,\delta(\theta_1 - \theta_2)\,\delta(\phi_1 - \phi_2) \\ &= \frac{1}{r_1^2}\,\delta(r_1 - r_2)\,\delta(\cos\theta_1 - \cos\theta_2)\,\delta(\phi_1 - \phi_2).\end{aligned} \tag{A.17}$$

指数関数の級数和をデルタ関数の級数和で置き換える**ポアソンの和公式**は，しばしば有用である．以下にいくつかの関連する公式をあげる．

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{2\pi inx} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - m), \tag{A.18}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{inx} = 2\pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2m\pi), \tag{A.19}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \cos nx = -\frac{1}{2} + \pi \sum_{m=-\infty}^{\infty} \delta(x - 2\pi m), \tag{A.20}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sin nx = \frac{1}{2} \cot \frac{x}{2}. \tag{A.21}$$

A.2 ベクトル解析

電磁気学では，次の関数がしばしば現れる．

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{E} \equiv \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z}, \tag{A.22}$$

$$\mathrm{grad}\,\phi \equiv \left(\frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y}, \frac{\partial \phi}{\partial z}\right), \tag{A.23}$$

$$\Delta\phi \equiv \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}, \tag{A.24}$$

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} \equiv \left(\frac{\partial A_z}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}, \frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}, \frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right). \tag{A.25}$$

div はダイバージェンス (divergence)，grad はグラディエント (gradient)，Δ はラプラシアン (Laplacian)，rot はローテーション (rotation) と読む．grad は ∇ (ナブラ，nabla)，rot は curl (カール) とも書かれる．これらの演算子の間には次の恒等式が成立する．

$$\mathrm{div}\ \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = 0, \tag{A.26}$$

$$\mathrm{rot}\ \mathrm{grad}\,\phi = 0, \tag{A.27}$$

$$\mathrm{rot}\ \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = \mathrm{grad}\ \mathrm{div}\,\boldsymbol{A} - \Delta\boldsymbol{A}. \tag{A.28}$$

実際，(A.26) は，

$$\begin{aligned}
\mathrm{div}\ \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} &= \frac{\partial(\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})_x}{\partial x} + \frac{\partial(\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})_y}{\partial y} + \frac{\partial(\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})_z}{\partial z} \\
&= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial A_x}{\partial y} - \frac{\partial A_y}{\partial z}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) \\
&= 0
\end{aligned}$$

と示される．ここで，$(\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A})_x$ は rot $\boldsymbol{A}$ の x 成分を表している．(A.27), (A.28) は，それぞれ x 成分に着目すると，

$$(\text{rot grad}\,\phi)_x = \frac{\partial(\text{grad}\,\phi)_z}{\partial y} - \frac{\partial(\text{grad}\,\phi)_y}{\partial z} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial y \partial z} - \frac{\partial^2 \phi}{\partial z \partial y} = 0,$$

$$\begin{aligned}(\text{rot rot}\,\boldsymbol{A})_x &= \frac{\partial(\text{rot}\,\boldsymbol{A})_z}{\partial y} - \frac{\partial(\text{rot}\,\boldsymbol{A})_y}{\partial z} \\ &= \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) - \frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right) \\ &= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial A_x}{\partial x} + \frac{\partial A_y}{\partial y} + \frac{\partial A_z}{\partial z}\right) - \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) A_x \\ &= (\text{grad div}\,\boldsymbol{A} - \Delta \boldsymbol{A})_x\end{aligned}$$

のように示せる．y, z 成分も同様に示せる．

ベクトル解析の計算の手間を省くためのいくつかの便利な記法がある．まず，$i = x, y, z$ に関する偏微分は ∂_i と略記される．**エディントン記号** ϵ_{ijk} は，$i = x$, $j = y$, $k = z$ およびその偶置換に対しては $+1$，奇置換に対しては -1，その他に対しては 0 をとる．0 でない成分のみを書き下すと，

$$\epsilon_{xyz} = \epsilon_{yzx} = \epsilon_{zxy} = 1, \qquad \epsilon_{xzy} = \epsilon_{yxz} = \epsilon_{zyx} = -1. \tag{A.29}$$

また，くり返し現れる記号については和をとるものと約束する，**アインシュタインの規約**を用いるのが便利である．この規約を使うと，

$$\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{B} = A_i B_i, \qquad \boldsymbol{A}^2 = A_i^2, \qquad \nabla = \partial_i^2, \qquad (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B})_i = \epsilon_{ijk} A_j B_k$$

などと書ける．また，

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ilm} = \delta_{jl}\delta_{km} - \delta_{jm}\delta_{kl} \tag{A.30}$$

であることがわかる．さらに，$f_{jk} = f_{kj}$ なる任意の対称関数に対して，

$$\epsilon_{ijk} f_{jk} = 0 \tag{A.31}$$

である．これらの記号を用いると (A.22)–(A.25) は，

$$\text{div}\,\boldsymbol{E} = \partial_i E_i, \qquad (\text{grad}\,\phi)_i = \partial_i \phi, \qquad \Delta\phi = \partial_i^2 \phi, \qquad (\text{rot}\,\boldsymbol{A})_i = \epsilon_{ijk}\partial_j A_k$$

などと表現できる．また，(A.28) の証明も次のように簡単化される．

$$\text{div rot}\,\boldsymbol{A} = \partial_i \epsilon_{ijk} \partial_j A_k = \epsilon_{ijk} \partial_i \partial_j A_k = 0 \qquad ((\text{A.31})\ \text{を使った}),$$

$$(\text{rot grad}\,\phi)_i = \epsilon_{ijk}\partial_j \partial_k \phi = 0,$$

$$
\begin{aligned}
(\mathrm{rot\ rot}\,\boldsymbol{A})_i &= \epsilon_{ijk}\partial_j\epsilon_{klm}\partial_l A_m = \epsilon_{kij}\epsilon_{klm}\partial_j\partial_l A_m \\
&= (\delta_{il}\delta_{jm} - \delta_{im}\delta_{jl})\partial_j\partial_l A_m \qquad ((\mathrm{A.30})\ を使った) \\
&= \partial_j\partial_i A_j - \partial_j^2 A_i \\
&= (\mathrm{grad\,div}\boldsymbol{A})_i - \Delta A_i.
\end{aligned}
$$

この他，しばしば現れるベクトル解析の公式を列挙しておく．これらの証明も上記の記号を用いることで示すことができる．

$$\mathrm{grad}(f\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{grad}\,f + f\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}, \tag{A.32}$$

$$\mathrm{rot}(f\boldsymbol{A}) = \mathrm{grad}\,f \times \boldsymbol{A} + f\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}, \tag{A.33}$$

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{B}\cdot\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\cdot\boldsymbol{B}, \tag{A.34}$$

$$\mathrm{rot}(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B}) = \boldsymbol{A}\mathrm{div}\boldsymbol{B} - \boldsymbol{B}\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} + (\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{grad})\,\boldsymbol{A} - (\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{grad})\,\boldsymbol{B}, \tag{A.35}$$

$$\mathrm{grad}(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{grad})\,\boldsymbol{B} + (\boldsymbol{B}\cdot\mathrm{grad})\,\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\times\mathrm{rot}\,\boldsymbol{B} + \boldsymbol{B}\times\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}. \tag{A.36}$$

A.3 汎関数

普通の 1 価関数 $f(x)$ の値は引き数 x の値を定めると決まるが，(6.71) の $E[\Psi]$ の値は関数 Ψ を与えることにより決まる．このように，関数ごとに値が決まる「関数の関数」を**汎関数**という．

汎関数微分は次のように定義される．

$$\frac{\delta f[\Psi(\cdot)]}{\delta\Psi(x)} \equiv \lim_{\epsilon\to 0}\frac{f[\Psi(\cdot)+\epsilon\delta(\cdot - x)] - f[\Psi(\cdot)]}{\epsilon}. \tag{A.37}$$

ここで，$\cdot$ は Ψ の引数である．具体的には，

$$\frac{\delta\Psi(x')}{\delta\Psi(x)} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{(\Psi(x')+\epsilon\delta(x'-x)) - \Psi(x')}{\epsilon} = \delta(x'-x), \tag{A.38}$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\delta\Psi^2(x')}{\delta\Psi(x)} &= \lim_{\epsilon\to 0}\frac{[\Psi(x')+\epsilon\delta(x'-x)]^2 - \Psi^2(x')}{\epsilon} \\
&= 2\Psi(x)\delta(x'-x).
\end{aligned} \tag{A.39}
$$

Ψ が多変数 $x_1,\cdots,x_N$ の関数の場合の汎関数微分は，

$$
\begin{aligned}
&\frac{\delta f[\Psi(x'_1,\cdots,x'_N)]}{\delta\Psi(x_1,\cdots,x_N)} \\
&\quad\equiv \lim_{\epsilon\to 0}\frac{f[\Psi(x'_1,\cdots,x'_N)+\epsilon\delta(x'_1-x_1)\cdots\delta(x'_N-x_N)]-f[\Psi(x'_1,\cdots,x'_N)]}{\epsilon}
\end{aligned}
\tag{A.40}
$$

で定義される．これを (6.72) のエネルギー汎関数の $\Psi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)$ に関する汎関数微分に適用すると (Ψ が実数であることに注意して)，

$$
\begin{aligned}
&\frac{\delta}{\delta\Psi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)}\left(F-E\int d\boldsymbol{x}'_1\cdots\int d\boldsymbol{x}'_N\,|\Psi|^2\right) \\
&\quad=\lim_{\epsilon\to 0}\int d\boldsymbol{x}'_1\cdots\int d\boldsymbol{x}'_N \\
&\quad\quad\times\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\Big[(\nabla_i(\Psi(\boldsymbol{x}'_1,\cdots,\boldsymbol{x}'_N)+\epsilon\delta(\boldsymbol{x}'_1-\boldsymbol{x}_1)\cdots\delta(\boldsymbol{x}'_N-\boldsymbol{x}_N)))^2\right. \\
&\quad\quad-(\nabla_i\Psi(\boldsymbol{x}'_1,\cdots,\boldsymbol{x}'_N))^2\Big]+(V(\boldsymbol{x}'_1,\cdots,\boldsymbol{x}'_N)-E) \\
&\quad\quad\left.\times\Big[(\Psi(\boldsymbol{x}'_1,\cdots,\boldsymbol{x}'_N)+\epsilon\delta(\boldsymbol{x}'_1-\boldsymbol{x}_1)\cdots\delta(\boldsymbol{x}'_N-\boldsymbol{x}_N))^2-\Psi^2(\boldsymbol{x}'_1,\cdots,\boldsymbol{x}'_N)\Big]\right\} \\
&\quad=-2\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\nabla_i^2\Psi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)+2(V(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N)-E)\Psi(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_N) \\
&\quad=0.
\end{aligned}
\tag{A.41}
$$

ここで，2 番目の等式を得る際に部分積分を行った．こうして，シュレーディンガー方程式

$$
\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_i\nabla_i^2+V(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_N)\right)\Psi=E\Psi \tag{A.42}
$$

が得られる．基底状態以外では，Ψ は一般に複素数となる．この場合は，Ψ と Ψ^* が独立とみなして汎関数微分する必要がある．

汎関数 $f[\Psi]$ の変分は，

$$
\delta f[\Psi(\cdot)]=\int dx\,\frac{\delta f[\Psi(\cdot)]}{\delta\Psi(x)}\,\delta\Psi(x) \tag{A.43}
$$

で定義される．f が g の汎関数でかつ g が Ψ の汎関数であるとき，f の Ψ に関する汎関数微分は次の**連鎖則**に従って計算できる．

$$
\frac{\delta f\big[g[\Psi(\cdot)]\big]}{\delta\Psi(x)}=\int dy\,\frac{\delta f\big[g[\Psi(\cdot)]\big]}{\delta g[\Psi(y)]}\,\frac{\delta g[\Psi(y)]}{\delta\Psi(x)}. \tag{A.44}
$$

索　引

あ　行

アインシュタイン-ド・ブロイの関係式 Einstein-de Broglie formulae 1
アインシュタインの規約 Einstein's convention 234
アインシュタインの局所原理 Einstein's local principle 212, 217
アインシュタイン-ポドルスキー-ローゼン相関 Einstein-Podolsky-Rosen correlation 145, 202
アダマールゲート Hadamard gate 203, 224
アハラノフ-ボーム効果 Aharanov-Bohm effect 87
アンチバンチング効果 antibunching effect 129, 160
位相演算子 phase operator 103
位相ゲート phase gate 205
位相速度 phase velocity 184
1光子状態 single-photon state 114
1次干渉 first-order interference 118
1粒子密度行列 single-particle density matrix 166
井戸型ポテンシャル square-well potential 4, 159
EPR相関 EPR correlation 145, 202
EPRのパラドックス EPR's paradox 146
EPRペアー EPR pair 202, 219, 220
渦糸 vortex line 178
渦なし条件 irrotational condition 177
運動量の保存則 law of conservation of momentum 51
エディントン記号 Eddington's symbol 214, 234
エディントンのイプシロン Eddington's epsilon 65
エネルギー汎関数 energy functional 175
エネルギー保存則 law of conservation of energy 50
エネルギー量子 energy quantum 2, 41
エルミート演算子 Hermitian operator 14
エルミート共役 Hermitian conjugate 14
エルミート多項式 Hermite polynomial 43
エンタングルした状態 entangled state 201, 206, 207, 220
円偏光 circularly polarized light 228

オイラー方程式　Euler equation　180
応答関数　response function　181
オブザーバブル　observable　13, 14
オラクル　oracle　223

か　行

階層構造　hierarchical structure　157
階段関数　step function　173, 232
回転波近似　rotating-wave approximation　133, 147
角運動量　angular momentum　54
確率解釈　probabilistic interpretation　6
確率振幅　probability amplitude　6, 38
隠れた変数理論　hidden-variable theory　145, 202, 213
重ね合わせの状態　superposition state　144
ガリレイ変換　Galilean transformation　184
環境　environment　110, 190
還元密度演算子　reduced density operator　74
干渉縞の明暗比　fringe visibility　115, 124
完全系　complet set　19, 20
完全性条件　completeness relation　17, 19, 21, 43, 58, 63, 76, 147
観測の理論　theory of measurement　75
幾何光学　geometrical optics　26
基底状態　ground state　28
軌道角運動量　orbital angular momentum　52, 54
帰納性　induction　193
奇のパリティ　odd parity　62
ギブス-デュエムの関係式　Gibbs-Duhem relation　182
q-数　quantum number　13
Q 値　quality factor　154
球面調和関数　spherical harmonic function　59
キュービット　qubit　131, 197
凝縮体の波動関数　condensate wave function　172
共振器量子電気力学　cavity quantum electrodynamics, cavity QED　152
鏡像電荷　image charge　90
共鳴　resonance　47
協力現象　cooperative phenomenon　149
行列表示　matrix representation　14
極座標　polar coordinates　59, 232
局所実在論　local realism　213
巨視的実在論　macrorealism　189, 192, 193
巨視的な量子状態　macroscopic quantum state　188
巨視的量子現象　macroscopic quantum phenomenon　186
巨視的量子コヒーレンス　macroscopic quantum coherence　191
空間回転対称性　space-rotation symmetry　52
空間の並進対称性　space-translational symmetry　50
偶のパリティ　even parity　62
クーパー対　Cooper pair　174, 187
くぼみ　meniscus　178

グラウバーの定理　Glauber's theorem　98
クロネッカーのデルタ　Kronecker's delta　14, 92
クローン　clone　190, 207, 208
クローン禁止定理　no cloning theorem　209
クーロン・ゲージ　Coulomb gauge　82
計算基底　computational basis　197
ゲージ関数　gauge function　81
ゲージ変換　gauge transformation　81
ケットベクトル　ket vector　20
降演算子　lowering operator　56, 132, 147
交換関係　commutation relation　26
交換ゲート　swap gate　207
交換項　exchange term　128
交換子　commutator　22
光子数状態　photon-number state　95, 155
光子対　pair of photons　120, 125
恒等演算子　identity operator　16, 18, 20, 21
古典的測定器　classical measuring apparatus　10
古典ビット　classical bit　197
コヒーレンス時間　coherence time　119
コヒーレンス長　coherence length　170
コヒーレント状態　coherent state　95, 98
コペンハーゲン解釈　Copenhagen interpretation　9
固有エネルギー　eigenenergy　4
固有関数　eigenfunction　4
ゴールドストーン・モード　Goldstone mode　119
混合状態　mixed state　71

さ　行

最小不確定状態 minimum-uncertainty state　26, 100
最大限もつれた状態　maximally entangled state　188, 217
c-数　classical number　13
ジェインズ-カミングス・ハミルトニアン　Jaynes-Cummings Hamiltonian　133
GHZ 状態　GHZ state　217
時間順序演算子　time-ordering operator　24
時間の並進対称性　time-translation symmetry　50
時間発展演算子　time-development operator　18, 50
磁気量子数　magnetic quantum number　58
試験電荷　test charge　90
自然線幅　natural linewidth　150
自然放出　spontaneous emission　95, 150
磁束量子　flux quantum　191
実在の波　real wave　6
実在の要素　element of reality　217, 218
自発的対称性の破れ　spontaneous symmetry breaking　119
シービット　cbit　197
射影演算子　projection operator

77
射影仮説　projection postulate　75
射影測定　projective measurement 77
集団的スピン演算子　collective spin operator　148
縮退している　degenerate　4
寿命　lifetime　152
シュレーディンガーの猫状態 Schrödinger's cat state　188, 191
シュレーディンガーの猫のパラドックス Schrödinger's cat paradox　190
シュレーディンガー表示　Schrödinger representation　20, 22
シュレーディンガー方程式 Schrödinger equation　3, 22
循環　circulation　178
——の量子化　quantization of ～ 178
純粋状態　pure state　70
準粒子　quasiparticle　103
準粒子励起　quasiparticle excitation 181
昇演算子　raising operator　56, 132, 147
昇降演算子　raising and lowering operators　132
消滅演算子　annihilation operator 39, 93
常流動体　normal fluid　181
常流動体密度　normal fluid density 185
ジョセフソン効果　Josephson effect 186, 187
ジョセフソン接合　Josephson junction 187, 191
真空状態　vacuum state　40
真空場揺らぎ　vacuum field fluctuations　95
真空ラビ分裂　vacuum Rabi splitting 135
数演算子　number operator　41, 112
スカラーポテンシャル　scalar potential　80
スクイズド状態　squeezed state 99, 100, 102
スピン角運動量　spin angular momentum　55, 64
スピンシングレット対　spin-singlet pair　201, 220
スペースライク　space-like　212
正確定　positive definite　15
正規直交基底　orthonormal basis 16
正規直交条件　orthonormality condition　13, 58, 166
正規直交性　orthonormality　19
制御オラクル　controlled oracle 223
制御キュービット　control qubit 206
制御 NOT ゲート　controlled-NOT gate　206
正弦演算子　sine operator　106
生成演算子　creation operator　39, 93
生成子　generator　50, 53, 64
正値演算子　positive operator　15, 78
正値演算子値測度　positive operator-valued measure, POVM 78
ゼノンのパラドックス　Zeno's paradox

142
零点エネルギー　zero-point energy　5, 27, 40
線形　linear　189
線形応答理論　linear response theory　181
線形性　linearity　189
双極子力　dipole force　135
相互作用表示　interaction representation　23
操作的量子測定理論　operational quantum theory of measurement　75
相補性原理　principle of complementarity　110
測定演算子　measurement operator　75
測定の理論　theory of measurement　75

た　行

対角項　diagonal term　161
対称化　symmetrization　160
対称性　symmetry　49
第二量子化　second quantization　92
大分配関数　grand partition function　162
タイムライク　time-like　212
多世界解釈　many-world interpretation　11
多体量子状態の安定性　robustness of many-body quantum states　188
縦波　longitudinal wave　83
チェレンコフ放射　Cherenkov radiation　184
遅延選択　delayed choice　146, 203
秩序パラメーター　order parameter　157, 172
長距離秩序　long-range order　172
超高密度符号化　superdense coding　222
超伝導量子干渉デバイス　superconducting quantum interference device, SQUID　191
超放射　superradiance　149
超流動速度　superfluid velocity　177
直接項　direct term　128
直線偏光　linearly polarized light　228
直交位相振幅　quadrature-phase amplitudes　99
直交位相振幅スクイズド状態　quadrature-phase amplitude squeezed state　100
定常状態　stationary state　3
デコヒーレンス　decoherence　110, 190, 192
デルタ関数　delta function　14
転移温度　transition temperature　163, 164, 186
電気双極子相互作用　electric dipole interaction　147
電磁ポテンシャル　electromagnetic potential　80
転置　transpose　14
ドイチュ-ジョサのアルゴリズム　Deutsch-Jozsa algorithm　225
同時固有状態　simultaneous eigenstate　31
同時測定　simultaneous measurement　31
同種粒子の識別不可能性の原理　principle of indistinguishability of

identical particles 159
等方的 isotropic 52
ド・ブロイの関係式 de Broglie relation 2
ド・ブロイ波長 de Broglie wavelength 2
トラップ状態 trapping state 155
トラヴィス-カミングス模型 Travis-Cummings model 148
トレース trace 71
——条件 ～ condition 71
——の循環性 cyclic property of the ～ 71
ドレストアトム dressed atom 135
トンネル効果 tunneling effect 44, 187
トンネル接合 tunnel junction 186

な 行

内部自由度 internal degrees of freedom 64
2 価表現 double valued representation 66
2 次干渉 second-order interference 118
2 準位原子 two-level atom 131
2 流体模型 two-fluid model 182
熱的ド・ブロイ長 thermal de Broglie length 170
熱的ド・ブロイ波長 thermal de Broglie wavelength 170
熱力学的極限 thermodynamic limit 171
熱力学的変数 thermodynamic variable 172
熱力学的ポテンシャル thermodynamic potential 162
粘性流 viscous flow 181
ノーマルオーダー normal order 112

は 行

ハイゼンベルクの運動方程式 Heisenberg's equation of motion 23
ハイゼンベルクの不確定性関係 Heisenberg's uncertainty relation 26
ハイゼンベルク表示 Heisenberg representation 20, 22
排他的論理和 exclusive OR 206
陪ルジャンドル多項式 associated Legendre polynomial 62
パウリ行列 Pauli matrix 65, 132, 197
パウリの排他原理 Pauli's exclusion principle 129, 158, 161
波束の収縮 reduction of the wave packet 9, 221
波動関数 wave function 3
——の一価性 single-valuedness of the ～ 57
場の演算子 field operator 164
場の量子化 field quantization 93
ハミルトニアン Hamiltonian 3
パラダイムシフト paradigm shift ii
パラメトリック蛍光 parametric fluorescence 125
パリティ変換 parity operation 62
汎関数 functional 235
汎関数微分 functional derivative 235
反交換関係 anticommutation relation 65, 165
反交換子 anticommutator 165

反対称化　antisymmetrization　160
バンチング効果　bunching effect　129, 159
POVM　positive operator-valued measure　78, 210–212
非局所性　nonlocality　i
非局所相関　nonlocal correlation　125, 145, 202, 215
微小共振器　microcavity　94, 131
非線形光学過程　nonlinear optical process　102
非対角長距離秩序　off-diagonal long-range order, ODLRO　169
非対角項　off-diagonal term　161
非破壊測定が可能であること　noninvasive measurability　193
非分離性　nonseparability　i, 201
標準量子限界　standard quantum limit, SQL　100
標的キュービット　target qubit　206
ヒルベルト空間　Hilbert space　19
ファラデーの電磁誘導の法則　Faraday's law of electromagnetic induction　90
フェルミ-ディラック統計　Fermi-Dirac statistics　158
フェルミの黄金律　Fermi's golden rule　39
フェルミ波数　Fermi wavenumber　173
フェルミ粒子　fermion　9, 158
フォック状態　Fock state　41
フォトンカウンター　photon counter　76
フォトンカウンティング　photon counting　112
フォン・ノイマンの連鎖　von Neumann chain　10
複合粒子　composite particle　158
複製　clone　190, 207, 208
復活現象　revival phenomenon　139
物質波　matter wave　2
普遍性定理　universality theorem　208
ブラベクトル　bra vector　20
プランク定数　Planck constant　1
ブロッホ関数　Bloch function　52
ブロッホ球面　Bloch sphere　199
ブロッホの定理　Bloch's theorem　52
平均場　mean field　157
ベーカー-ハウスドルフの公式　Baker-Hausdorf formula　96
冪等条件　idenpotency condition　70, 199
ベクトルポテンシャル　vector potential　79
ベル状態　Bell state　220
ベルの不等式　Bell's inequality　213, 214
変位演算子　displacement operator　95
変位電流　displacement current　84
変換関数　transformation function　21
変分原理　variational principle　175
ポアソンの和公式　Poisson's summation formula　232
ポアソン分布　Poisson distribution　97
ポアソン方程式　Poisson equation

82
ボーア半径 Bohr radius 29
ポアンカレの回帰定理 Poincaré's recurrence theorem 140
方位量子数 azimuthal quantum number 58
崩壊現象 collapse phenomenon 138
法が 2 の加法 addition modulo 2 206
ボゴリューボフ変換 Bogoliubov transformation 101
ボース-アインシュタイン凝縮 Bose-Einstein condensation, BEC 119, 157, 162, 164
ボース-アインシュタイン統計 Bose-Einstein statistics 158
ボース粒子 boson 9, 158
保存則 conservation law 49
ポテンシャル流 potential flow 181

ま 行

マクスウェル方程式 Maxwell equation 79
マクスウェル-ボルツマン統計 Maxwell-Boltzmann statistics 158
密度演算子 density operator 70, 72, 167, 217
密度行列 density matrix 199
メゾスコピック mesoscopic 192, 195
もつれた状態 entangled state 121, 193, 201, 212

や 行

輸送係数 transport coefficient 181
ユニタリー unitary 18
ユニタリー演算子 unitary operator 16, 189
余弦演算子 cosine operator 106
横波 transverse wave 82, 83

ら 行

ラビ周波数 Rabi frequency 137
ラビ章動 Rabi nutation 137
ラビ振動 Rabi oscillation 137, 152, 191
ラビ分裂 Rabi splitting 135
ランダウの判定条件 Landau criterion 183, 184
離散的な対称性 discrete symmetry 51
離調周波数 detuning frequency 134
リドベリー原子 Rydbery atom 154
リュードベリ定数 Rydberg constant 29
量子暗号 quantum cryptography 228
量子回帰定理 quantum recurrence theorem 140
量子化軸 quantization axis 58
量子化の手続き quantization procedure 2
量子ゲート quantum gate 203
量子消去 quantum erasure 122
量子状態のもつれ entanglement of quantum states i
量子ゼノン効果 quantum Zeno effect 142
量子ゼノンパラドックス quantum Zeno paradox 142

量子テレポーテーション　quantum teleportation　219
量子統計　quantum statistics　9, 55, 122
量子反射　quantum reflection　44
量子ビット　quantum bit　131, 197
量子並列性　quantum parallelism　200
量子ポテンシャル　quantum potential　10
臨界速度　critical velocity　184
ルジャンドル多項式　Legendre polynomial　62
レゲット-ガーグの不等式　Leggett-Garg inequality　193, 194
レジスター　register　199
連鎖則　chain rule　236
連続の方程式　equation of continuity　80
ローレンツ力　Lorentz force　87

著者紹介

上田正仁
うえだ まさひと

1963年 大阪市生まれ
1986年 東京大学理学部物理学科卒業
1988年 東京大学大学院理学系研究科修士課程修了（物理学専攻）
1988年 日本電信電話株式会社基礎研究所研究員
1994年 広島大学工学部助教授
1996-1997年 イリノイ大学アーバナ・シャンペン校客員研究員
2000年 東京工業大学大学院理工学研究科教授（現在に至る）
学　位 博士（理学）（東京大学）

2004年11月30日 初版発行

現代量子物理学
— 基礎と応用 —

著　者 上田正仁
発行者 山本 格

発行所 株式会社 培風館
東京都千代田区九段南4-3-12・郵便番号102-8260
電話(03)3262-5256(代表)・振替00140-7-44725

D.T.P. アベリー・平文社印刷・三水舎製本

PRINTED IN JAPAN

ISBN4-563-02265-9 C3042